



Etude théorique de l'absorption par porteurs libres dans les structures à cascade quantique

Camille Ndebeka-Bandou

► To cite this version:

Camille Ndebeka-Bandou. Etude théorique de l'absorption par porteurs libres dans les structures à cascade quantique. Physique Quantique [quant-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2014. Français. NNT : 2014PA066185 . tel-01080595

HAL Id: tel-01080595

<https://theses.hal.science/tel-01080595>

Submitted on 5 Nov 2014

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE

THÈSE DE DOCTORAT

Spécialité : **Physique de la Matière Condensée**
Ecole Doctorale **397**

préparée au **Laboratoire Pierre Aigrain**

présentée par

Camille NDEBEKA-BANDOU

pour obtenir le grade de

DOCTEUR de l'Université Pierre et Marie Curie

Sujet de la thèse:

Etude théorique de l'absorption par porteurs libres dans les structures à cascade quantique

soutenue publiquement le 3 Juillet 2014 devant le jury composé de:

Pr. Emmanuelle DELEPORTE	Rapporteur
Pr. Guillaume CASSABOIS	Rapporteur
Dr. Virginie TRINITE	Examineur
Pr. Maria CHAMARRO	Examineur
Pr. Jérôme FAIST	Examineur
Pr. Carlo SIRTORI	Examineur
Dr. Francesca CAROSELLA	Co-directrice de thèse
Dr. Gérald BASTARD	Directeur de thèse

Résumé

La demande croissante de dispositifs photoniques dans la gamme térahertz (THz) a conduit au développement des Lasers à Cascade Quantique (LCQ). Réalisés en 1994 dans l'infrarouge moyen, ces lasers unipolaires à semiconducteurs comptent désormais parmi les sources les plus prometteuses pour l'émission THz. Néanmoins, de nombreux phénomènes de pertes optiques limitent leurs performances et l'optimisation de ces dispositifs demeure d'actualité. Parmi les sources de pertes, l'absorption par porteurs libres, qui résulte de transitions intra- et inter-sousbande obliques activées par toute source de désordre brisant l'invariance par translation dans le plan des couches, doit être précisément modélisée. Ce processus est bien documenté pour les matériaux massifs où le modèle semi-classique de Drude peut être appliqué. En revanche, pour les LCQ, celui-ci prédit des coefficients d'absorption comparables voire supérieurs aux réels gains laser.

Ce travail de thèse expose un modèle quantique de l'absorption par porteurs libres dans les structures à cascade quantique suivant deux approches théoriques différentes : un développement perturbatif au premier ordre au potentiel de désordre et une diagonalisation numérique du Hamiltonien du système désordonné. Ces travaux montrent que l'absorption par porteurs libres est très faible et radicalement différente du résultat semi-classique. Ils font également l'analyse des différentes contributions au spectre d'absorption ainsi que la possibilité d'ajuster la forme et la largeur de raie par une ingénierie de dopage. D'importants effets de localisation spatiale des états électroniques par le désordre ainsi que leur influence sur les taux de diffusion ont également été étudiés.

Mots-clé : absorption par porteurs libres, structure à cascade quantique, désordre, transition intra- and inter-sousbande, diffusion, térahertz.

Abstract

The demand to produce reliable THz detectors and emitters has lead to a significant improvement of the Quantum Cascade Lasers (QCLs). First demonstrated in 1994 in the mid-infrared range, these unipolar semiconductor lasers are one of the most promising photonic sources for THz emission. Nevertheless, various optical loss phenomena limit their performances and the improvement of these devices is intensively researched. Among the possible loss sources, the Free Carrier Absorption (FCA), that arises from intra- and inter-subband oblique transitions activated by any disorder source destroying the translational invariance in the layer plane, has to be accurately modeled. FCA is well documented for bulk materials where the semiclassical Drude model can be used. For QCLs, this model predicts FCA coefficients that are comparable or larger than the actual QCL gains.

This work presents a quantum modeling of FCA in quantum cascade structures following two theoretical approaches : a perturbative expansion at the first order in the disorder potential and a numerical diagonalization of the Hamiltonian in presence of disorder. These calculations show that FCA is very small in QCLs and radically differs from the semiclassical Drude result. Moreover, they point out the different contributions to the absorption spectrum and the possibility of ajusting the absorption linewidth and lineshape by dopant engineering. Important disorder-induced localization effects have been identified as well as their non negligible influence on the electronic scattering rates.

Keywords : free carrier absorption, quantum cascade structure, disorder, intra- and inter-subband transition, scattering, terahertz.

Table des matières

Résumé	iii
Abstract	iv
Table des matières	v
Introduction générale	1
I Structures à cascade quantique : pertes optiques et diffusion	5
I.1 Introduction	5
I.2 Laser à cascade quantique	6
I.3 Etats de conduction	10
I.4 Pertes optiques et absorption	12
I.5 Désordre et sources de diffusion	17
I.5.1 Impuretés ionisées	17
I.5.2 Désordre d'alliage	19
I.5.3 Rugosité d'interface	21
I.5.4 Phonons	26
I.6 Conclusion	27
II Absorption par porteurs libres	29
II.1 Introduction	29
II.2 Modèle de Drude	30
II.3 Description quantique : approche perturbative	33
II.3.1 Modèle théorique et mécanisme	33
II.3.2 Cas des diffuseurs élastiques	37
II.3.3 Cas des diffuseurs inélastiques	46
II.3.4 Evolution en température	56
II.3.5 Polarisation dans le plan des couches	59
II.4 Conclusion	61
III Largeur et forme de raie d'absorption	65
III.1 Introduction	65
III.2 Diagonalisation exacte	66
III.3 Spectre d'énergie et états liés	72
III.4 Absorption en présence de défauts d'interface	77
III.4.1 Comparaison : approche perturbative et diagonalisation exacte	78
III.4.2 Différentes contributions au spectre d'absorption	79
III.4.3 Autres modèles d'absorption	82
III.5 Absorption en présence d'impuretés ionisées	86
III.5.1 Écrantage	86
III.5.2 Ingénierie de dopage	89

III.5.3 Cas des structures térahertz	96
III.6 Quasi-règles de sélection optiques	98
III.7 Conclusion	100
IV Fuite des porteurs, taux de diffusion non radiative	103
IV.1 Introduction	103
IV.2 Approche standard : approximation de Born	104
IV.3 Approche numérique exacte	106
IV.4 Localisation spatiale induite par le désordre	107
IV.5 Influence des paramètres de désordre	110
IV.5.1 Comparaison des deux approches	110
IV.5.2 Modèle de l'état de type s	112
IV.5.3 Densité d'impuretés	114
IV.5.4 Position des dopants dans la structure	116
IV.6 Cas des structures térahertz	117
IV.7 Conclusion	119
Conclusion générale	121
Liste des publications	125
Actes de conférence	127
Bibliographie	129

Introduction générale

Le domaine térahertz (THz) est une région du spectre électromagnétique à la frontière entre les technologies électroniques et photoniques qui s'étend de 0.1 à 100 THz. Bien qu'il s'agisse d'une gamme de fréquence pour laquelle de nombreuses applications ont été identifiées autant sur le plan fondamental qu'industriel [1], celle-ci est restée inexplorée jusqu'à très récemment à cause du manque de dispositifs appropriés [2]. Grâce aux progrès récents des nanosciences, notamment en matière de nanofabrication, ce "fossé THz" est graduellement rempli par l'émergence et l'amélioration de sources et de détecteurs novateurs [3–6].

Parmi ceux-ci, les Lasers à Cascade Quantique (LCQ) sont des lasers à semiconducteurs unipolaires pour lesquels l'émission de photons a lieu entre deux états de conduction [7]. Fruits d'une ingénierie de bandes et d'une maîtrise de la croissance de couches de semiconducteurs nanométriques, ils se composent d'une série périodique de puits quantiques couplés. A l'intérieur d'une période donnée, les électrons issus de la période précédente sont injectés par effet tunnel vers le niveau supérieur de la transition laser. Ils émettent un photon en relaxant vers le niveau inférieur dont ils sont ensuite extraits par effet tunnel et/ou par émission de phonons optiques vers la période suivante. Un même électron peut ainsi produire N photons par effet de cascade. La première réalisation d'un laser à cascade quantique date des années 1990 dans l'infrarouge moyen [8]. Depuis, leur longueur d'onde d'émission a progressé vers la gamme THz et c'est dans les années 2000 que les LCQ THz ont vu le jour [9]. Grâce à leur compacité et leur flexibilité d'ingénierie, les LCQ sont devenus les sources photoniques les plus prometteuses pour cette gamme de fréquence. Cependant, il n'existe toujours pas de source THz intense et fiable à température ambiante et les LCQ THz restent des dispositifs à optimiser. Leur développement reste à ce jour un sujet de recherche compétitif et international [10–14].

En effet, à ces longueurs d'onde où l'énergie des photons laser devient comparable à l'énergie d'activation thermique, la difficulté réside dans la conservation de l'inversion de population menacée par divers phénomènes de pertes [10]. Les premières réalisations industrielles des LCQ ont déjà vu le jour pour la gamme moyen infrarouge mais la compréhension des mécanismes physiques régissant les pertes est, pour ce qui concerne les LCQ THz, nettement insuffisante. On conçoit donc l'importance des études en amont qui visent à optimiser ces dispositifs quantiques complexes. L'amélioration des LCQ passe ainsi par l'optimisation du design des structures mais également par une compréhension détaillée des mécanismes de pertes.

Parmi ceux-ci, l'absorption des photons laser par les porteurs libres de la zone active est bien détaillée et bien documentée pour les matériaux massifs où le modèle semi-classique de Drude prédit une croissance de l'absorption en λ^p où $p \approx 2 - 3$

et λ est la longueur d'onde d'émission [15]. L'absorption par porteurs libres résulte de transitions optiques obliques (dans l'espace des vecteurs d'onde \vec{k}) médiées par les diffuseurs de la structure. Ce phénomène est connu dans les lasers inter-bande conventionnels pour être d'efficacité moyenne justement en raison des courtes longueurs d'onde [16]. Au contraire, dans les lasers intra-bande tels que les LCQ, pour lesquels les longueurs d'onde sont plus grandes, ce mécanisme doit être plus important. Pour ces hétérostructures quasi-bidimensionnelles, les estimations des pertes par porteurs libres obtenues par extrapolation des résultats semi-classiques conduisent à des valeurs de coefficient d'absorption qui, si elles s'avéraient exactes, prédiraient l'extinction des LCQ THz [17]. Il existe en effet très peu voire pas de calculs explicites et réalistes de ce mécanisme de pertes dans les structures à cascade quantique alors qu'une modélisation précise de celui-ci est nécessaire à l'amélioration de ces dispositifs.

Un autre effet sérieusement néfaste à l'émission des LCQ est la diffusion inter-sousbande des porteurs. Celle-ci ruine l'inversion de population en dépeuplant le niveau supérieur de la transition laser [18]. Les taux de diffusion relatifs à ces processus de pertes sont généralement évalués à l'approximation de Born qui ne tient pas compte de la nature fortement localisée des états électroniques de la structure réelle (c'est-à-dire en présence de désordre), ni même de l'existence d'états liés dont l'énergie se retrouve inférieure au minimum de sous-bande. Or, ces états particuliers doivent probablement jouer un rôle statistique important, notamment aux températures typiques de fonctionnement des structures THz. Pour ce processus-ci également, une modélisation réaliste incluant ces effets de désordre s'impose.

Le sujet principal de cette thèse s'inscrit donc dans ce contexte d'amélioration des LCQ et porte sur l'étude théorique des mécanismes de réabsorption des photons dans les structures à cascade quantique. Le but de ce travail est double. Il s'agit d'une part de proposer une analyse quantitative détaillée de ces phénomènes de pertes souvent traités de manière incomplète et d'autre part, d'apporter une description plus précise des phénomènes de diffusion entre états désordonnés des hétérostructures quasi-bidimensionnelles.

Ce manuscrit est organisé en quatre chapitres.

Le **chapitre I** s'inscrit dans la continuité de cette introduction générale et présente les généralités de base du fonctionnement et de l'architecture des structures à cascade quantique. Il détaille notamment les propriétés d'émission mais aussi les différentes sources de pertes optiques. Les différentes sources de désordre qui activent les transitions obliques de l'absorption par porteurs libres y sont présentées et les modèles théoriques et numériques que nous avons développés pour le traitement de ces différents diffuseurs y sont exposés.

Le **chapitre II** présente une première approche théorique de l'absorption par porteurs libres. Celle-ci repose sur un développement perturbatif des états électroniques au premier ordre au potentiel de diffusion. Dans un premier temps, les limites du modèle semi-classique de Drude seront discutées ainsi que la difficulté à extrapoler ces résultats semi-classiques aux structures à cascade quantique. Dans un second temps, l'approche perturbative elle-même sera ensuite détaillée où les cas de

transitions intra- et inter-sousbande obliques médiées par les défauts d'interface, les impuretés ionisées, le désordre d'alliage et les phonons seront traités. Ce chapitre se conclura par une étude de l'évolution des pertes par porteurs libres en température et par une comparaison des différentes configurations de polarisation de l'onde électromagnétique absorbée.

Le **chapitre III** détaille une seconde approche de calcul de l'absorption dans les LCQ. Celle-ci consiste à diagonaliser numériquement le Hamiltonien du système en présence de désordre. Deux types de diffuseurs statiques seront considérés pour cette étude : les défauts d'interface et les impuretés ionisées issues du dopage de la structure. Grâce à nos techniques numériques, les différentes contributions et leurs mécanismes physiques associés seront analysés. Ces résultats seront ensuite comparés aux résultats perturbatifs du chapitre II ainsi qu'à d'autres modèles courants d'absorption, fondés notamment sur les fonctions de corrélation. Ce chapitre se conclura par la démonstration de l'existence de quasi-règles de sélection optiques efficaces malgré la nature désordonnée de la structure. La possibilité d'ajuster la forme et la largeur de raie d'absorption inter-sousbande par ingénierie de dopage sera également discutée.

Le **chapitre IV** est consacré à l'étude des diffusions inter-sousbande entre états propres du système désordonné. En reprenant une approche numérique similaire à celle développée au chapitre III, nous analyserons l'influence des états liés et localisés par le désordre sur les taux de diffusion. Les dépendances de ces taux en fonction du nombre de diffuseurs et de leur position dans la structure seront étudiées.

Chapitre I

Structures à cascade quantique : pertes optiques et diffusion

I.1 Introduction

Le développement de techniques de croissance élaborées, telles que l'épithaxie par jets moléculaires [19, 20] et l'épithaxie en phase vapeur d'organo-métallique [21], a permis la réalisation d'hétérostructures de semiconducteurs quasi-bidimensionnelles (quasi-2D). Le contrôle de l'épaisseur des couches au plan atomique près ainsi que la variété des matériaux disponibles ont fait des hétérostructures quasi-2D des candidats idéaux pour les applications optoélectroniques et actuellement, les meilleurs lasers dans l'infrarouge (IR) et dans le visible sont des lasers à puits quantiques de semiconducteurs.

Dans ces structures nanométriques, l'alternance des couches des différents matériaux brise l'invariance par translation le long de l'axe de croissance. En conséquence, une hétérostructure quasi-2D idéale peut absorber une onde électromagnétique polarisée suivant cette même direction par le biais de transitions intra-bande de conduction. En revanche, aucune transition optique intra-bande n'est possible pour les autres configurations de polarisation.

La première observation expérimentale de l'émission inter-sousbande (ou intra-bande) a été reportée par Gornik *et al.* dans le gaz d'électrons 2D d'une structure Si/SiO₂ [22]. Suite à cette mesure, Ando *et al.* ont proposé une approche théorique des transitions inter-sousbande ainsi que du rôle joué par les diffuseurs et les effets N-corps dans ce processus radiatif [23]. Parallèlement, le concept de super-réseau fut proposé par Esaki et Tsu en 1970 [24]. Une telle hétérostructure est une séquence de puits quantiques couplés dont les barrières sont suffisamment fines pour autoriser le passage tunnel et la délocalisation des porteurs sur toute la structure. Cette idée a alors conduit Kazarinov et Suris à proposer un nouveau type d'émetteur intra-bande. Ils prédirent qu'une amplification de l'émission inter-sousbande pouvait être obtenue dans un super-réseau biaisé, c'est-à-dire soumis à un champ électrique statique approprié [25, 26]. Le concept de structure à cascade quantique était né. Il a fallu ensuite attendre l'optimisation des techniques de croissance et de nanofabrication pour que les premières observations d'émission inter-sousbande soient faites dans les matériaux III-V [27, 28], jusqu'à l'émergence des Lasers à Cascade Quantique (LCQ) avec la première observation d'une émission laser dans le moyen-IR en 1994

[8], puis en 2002 dans le domaine térahertz (THz) [9].

Mis à part les LCQ, un certain nombre de dispositifs, dont le fonctionnement repose aussi sur les transitions optiques intra-bande d'une structure à cascade quantique, a simultanément été développé [7, 29]. Parmi eux, on compte notamment les détecteurs infrarouge à puits quantiques (QWIP pour *Quantum Wells Infrared Detector*) [30] et les détecteurs à cascade quantique (QCD pour *Quantum Cascade Detector*) [31].

Les structures à cascade quantique dominent désormais l'optoélectronique dans le lointain infrarouge. Néanmoins, les performances de ces structures complexes et novatrices restent affectées par une variété de phénomènes de pertes. Une part importante de l'optimisation des LCQ, notamment ceux émettant dans la gamme THz, concerne la réduction des pertes optiques telles que l'absorption des photons laser par les porteurs de la structure.

Dans ce premier chapitre, nous exposons le contexte général de ce travail de thèse. Dans un premier temps, nous présenterons les principes de base des LCQ ainsi que leurs états de conduction. Dans un deuxième temps, nous détaillerons les différentes sources de pertes optiques qui dégradent leur émission, en particulier celles qui consistent en l'absorption des photons laser par les électrons. Ces processus étant fortement dépendants des mécanismes de diffusion, nous concluerons ce chapitre par une description détaillée des différents diffuseurs élastiques et inélastiques que nous considérerons dans les chapitres suivants comme les médiateurs de l'absorption par porteurs libres ou encore de la fuite non-radiative des porteurs.

I.2 Laser à cascade quantique

Ces lasers à semiconducteurs couvrent actuellement une vaste gamme spectrale qui s'étend du moyen-IR au THz. L'intérêt et le développement de ce dispositif quantique n'ont cessé de croître depuis sa création en 1994 et de nombreuses applications, aussi bien fondamentales qu'industrielles, ont déjà été identifiées. Parmi elles, on compte les techniques de spectroscopie [32, 33], l'imagerie biomédicale [34], la sécurité [35], les télécommunications [36] ou encore l'astronomie [37]. Le but de cette section n'est pas de proposer une revue détaillée des LCQ [38, 39] mais plutôt de présenter les principes de base de leur fonctionnement et de leur architecture qu'il est nécessaire d'exposer avant d'aborder les chapitres suivants.

Comme toute structure à cascade quantique, le LCQ est constitué d'une alternance de couches de semiconducteurs formant une série de puits quantiques couplés. Grâce à l'alternance des couches, les porteurs sont confinés spatialement dans la direction de croissance et leur énergie est quantifiée en états de sous-bande. Les LCQ se distinguent tout d'abord des diodes laser conventionnelles par leur unipolarité. La transition radiative a lieu exclusivement en bande de conduction, n'impliquant alors qu'un seul type de porteurs : les électrons. La figure I.1 compare les différents processus d'émission dans les hétérostructures quasi-2D. Le diagramme I.1.a représente l'émission bipolaire typique d'une diode laser. Le photon, d'énergie $\hbar\omega$, est produit par la recombinaison d'un électron de la bande de conduction et d'un trou de la bande de valence. L'énergie laser est forcément inférieure au gap d'énergie E_g du

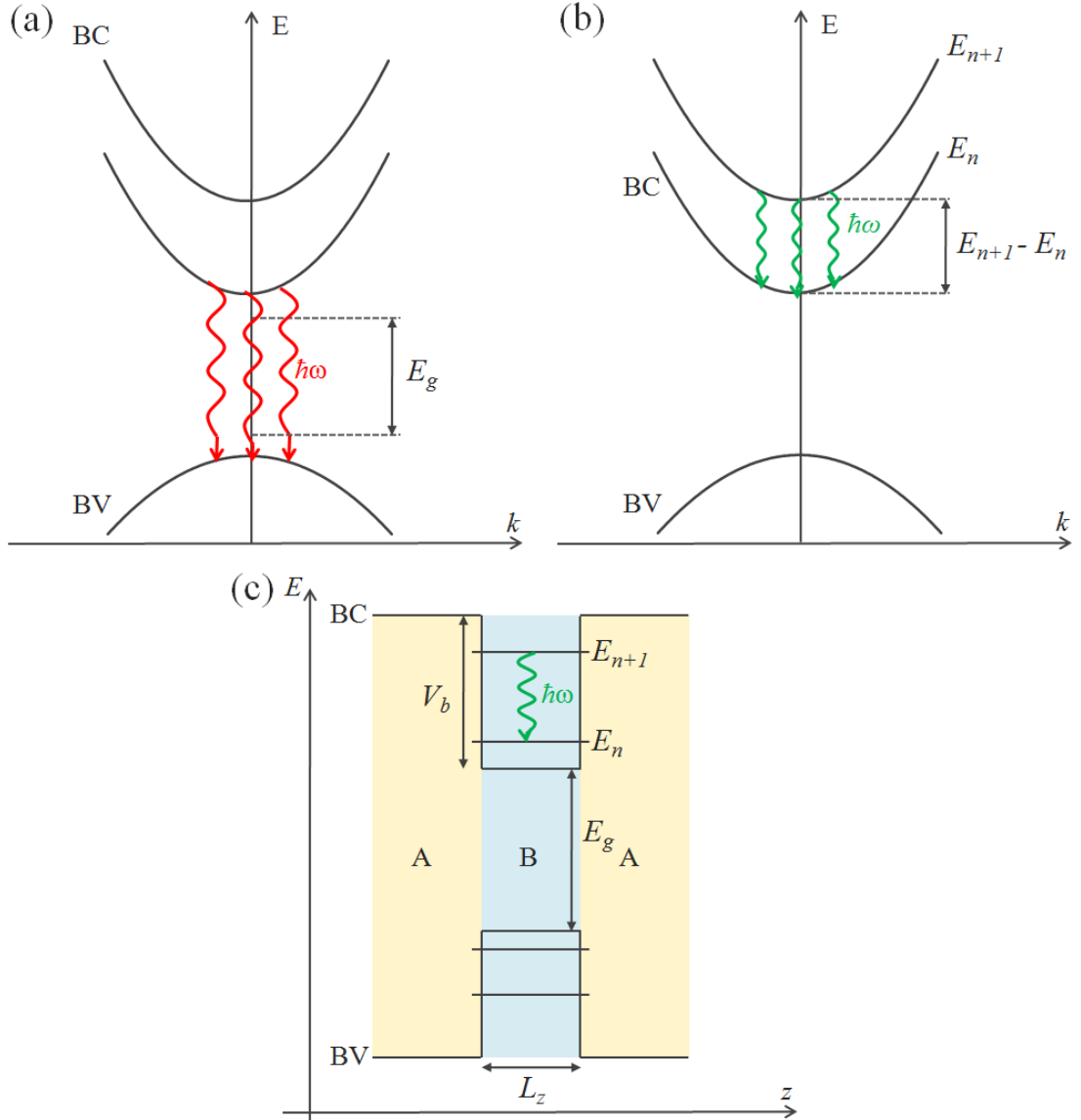


FIGURE I.1 – Comparaison des processus d'émission dans une hétérostructure quasi-2D. (a) Schéma de l'émission inter-bande. Cette transition optique est bipolaire et a lieu entre un électron de la bande de conduction (BC) et un trou de la bande de valence (BV). Le photon est émis à une énergie dont la valeur minimale est forcément supérieure au gap d'énergie du matériau puits : $\hbar\omega > E_g$. (b) Schéma de l'émission inter-sousbande. Cette transition optique est unipolaire et a lieu entre deux sous-bandes de conduction. Le photon est émis à l'énergie $\hbar\omega = E_{n+1} - E_n$. (c) Profil de bande d'un puits quantique réalisé à partir de l'alternance de couches du matériau barrière A et du matériau puits B. La structure est de largeur L_z et V_b désigne la discontinuité en bande de conduction.

matériau puits de la structure [40]. Le diagramme I.1.b représente l'émission unipolaire des LCQ. Dans ce cas de figure, le photon est produit par relaxation radiative inter-sousbande d'un électron de conduction et l'énergie de cette transition correspond à l'écart entre les deux niveaux de sous-bande $E_{n+1} - E_n$, pourvu que les masses effectives pour le mouvement dans le plan soient identiques. Par ailleurs, cette énergie est contrôlée par l'épaisseur (L_z) et la hauteur des puits quantiques (V_b). Con-

trairement aux lasers inter-bande où l'énergie E_g est intrinsèque au matériau utilisé [41], il est par contre possible d'ajuster la fréquence d'émission d'un LCQ par un choix judicieux des matériaux mais aussi des épaisseurs de couches [42, 43]. Le diagramme I.1.c représente la structure d'un puits quantique, brique de base des LCQ.

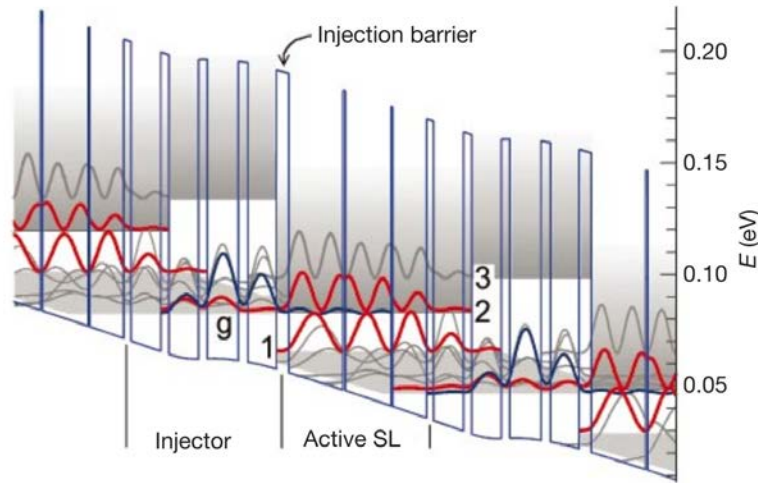


FIGURE I.2 – Profil en bande de conduction du premier LCQ THz réalisé. Cette figure est extraite de l'article de Köhler *et al.* [9].

La figure I.2, extraite de l'article de Köhler *et al.* [9], représente une portion du profil en bande de conduction du premier LCQ THz réalisé. Ce diagramme de bande met en évidence une autre caractéristique principale du LCQ : sa périodicité. La période est en effet l'unité fondamentale de ces émetteurs. Celle-ci est composée d'une zone active dans laquelle le photon laser est produit et d'une zone de transport tunnel formée de super-réseaux [44, 45]. On distingue alors deux parties principales de la période d'un LCQ aux fonctions bien distinctes mais pour autant complémentaires :

- l'injecteur est constitué d'un super-réseau dont les états sont organisés en minibande. Cette minibande de transport permet l'injection des porteurs dans la zone active.
- la région active est composée d'un nombre variable mais relativement faible de puits quantique¹. La région active est la zone dans laquelle l'inversion de population est réalisée et la transition laser est souvent qualifiée de verticale ou de diagonale. Ces deux cas correspondent à la situation où les états supérieur et inférieur de la transition sont localisés dans le même puits ou dans des puits différents.

En régime de fonctionnement, la structure entière est biaisée par l'application d'un champ électrique statique parallèle à l'axe de croissance. Ce potentiel permet d'aligner le niveau de l'injecteur avec le niveau supérieur de la transition laser, per-

1. Le nombre de puits quantiques de la zone active varie d'un laser à l'autre. Il peut s'élever à une dizaine de puits pour les LCQ IR. En revanche, pour les LCQ THz, les structures peuvent être plus simples et ne comporter que quelques puits [11, 46, 47].

mettant ainsi le passage des électrons dans la structure. Le même électron subit une relaxation entre deux niveaux de sous-bande de la zone active de chaque période, émettant un photon, et est extrait puis injecté dans la période suivante où il y subira une nouvelle relaxation. L'extracteur d'une période donnée coïncide ainsi avec l'injecteur de la période suivante. Dans certains lasers, le niveau bas de la transition laser peut être vidé par émission de phonon optique longitudinal. Dans ce cas, la séparation en énergie entre le niveau bas de la transition laser et l'extracteur est égale à l'énergie d'un phonon optique longitudinal et le LCQ est qualifié de LCQ à "dépopulation par phonon" [45, 47, 48]. Cette périodicité permet ainsi de "recycler" les porteurs d'une période à l'autre et de contribuer à chaque fois à l'émission laser. Un électron donné produira donc idéalement N_p photons (où N_p est le nombre de périodes du LCQ) par effet de cascade. La figure I.3 schématise le passage d'un électron dans une période du LCQ. Les flèches horizontales vertes représentent le transport tunnel à travers les minibandes injectrice et extractrice et la flèche verticale verte représente la transition radiative laser dans la zone active.

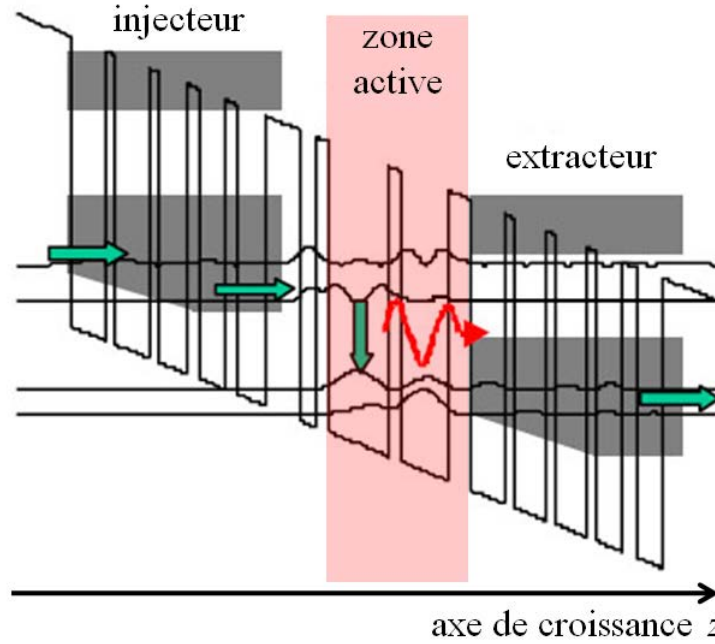


FIGURE I.3 – Schéma du passage d'un électron dans une période de LCQ. Celui-ci est injecté sur l'état supérieur de la transition laser de la zone active par effet tunnel (flèches horizontales vertes). Puis, il relaxe radiativement vers l'état inférieur de la transition laser (représenté par la flèche verticale verte) et le photon est émis (flèche rouge). L'électron est finalement extrait de la zone active par effet tunnel via la minibande de l'extracteur pour être injecté dans la période suivante.

Enfin, comme pour tout laser, une cavité est nécessaire à l'amplification de l'émission générée par la zone active. Cette amplification, autrement dit le gain laser, peut alors égaler les pertes et générer l'oscillation laser. Le milieu actif est intégré dans un guide d'onde qui, par un choix judicieux de sa composition et de sa géométrie, permet l'amplification et la collection du mode laser [39].

I.3 Etats de conduction

Un certain nombre d'approches théoriques et de techniques numériques a été développés pour calculer les états électroniques des hétérostructures quasi-2D dont les structures à cascade quantique. Dans les matériaux cristallins, l'invariance par translation conduit à l'existence d'états électroniques de Bloch $|n\vec{k}\rangle$ d'énergie $\varepsilon_{n\vec{k}}$ où \vec{k} est le vecteur d'onde 2D associé et n est l'indice de bande [49]. L'indice n est discret pour les états liés de la structure et continu pour les états étendus du continuum. Dans les semiconducteurs, le dopage et la température du système induisent une population finie de porteurs en bande de conduction. A l'équilibre thermique et en présence des faibles concentrations électroniques (faibles comparées à celles des métaux), il est correct d'approximer les relations de dispersion par des dispersions paraboliques centrées au minimum de la bande de conduction. Dans ce manuscrit, nous considérons une dispersion de bande isotrope. Ceci revient à prendre en compte une masse effective m^* scalaire pour les électrons. Cette situation est approximativement réalisée dans les matériaux très largement utilisés pour l'optoélectronique tels que le GaAs.

Dans sa version la plus simple (modèle à une bande), les fonctions d'onde enveloppe Ψ , d'énergie associée ε , sont solutions du Hamiltonien effectif H_{eff} du système [50, 51] :

$$H_{\text{eff}}\Psi(\vec{r}) = \varepsilon\Psi(\vec{r}) \quad (\text{I.1})$$

où $\vec{r} = (\vec{\rho}, z)$. Pour une hétérostructure quasi-2D, le mouvement des porteurs est quantifié le long de l'axe de croissance (z). Un tel système est alors décrit par le Hamiltonien enveloppe suivant :

$$H_{\text{eff}} = \vec{p}_z \frac{1}{2m^*(z)} \vec{p}_z + \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*(z)} + V_b(z) + V_{\text{dis}}(\vec{r}) \quad (\text{I.2})$$

où $V_b(z)$ est la discontinuité en bande de conduction entre le matériau barrière et le matériau puits et où $m^*(z)$ est la masse effective en bande de conduction. La valeur de ces deux paramètres dépend de la position z et présente des variations brutales aux interfaces de la structure à cause du changement de couche. Le terme V_{dis} tient compte des imperfections de l'échantillon telles que les impuretés, les phonons, les fluctuations de l'alliage ou encore la rugosité d'interface. Ce désordre, source de diffusion pour les porteurs, sera exposé en détail en section I.5.

En absence de désordre ($V_{\text{dis}} = 0$), la structure est invariante par translation dans le plan des couches de croissance (x, y). L'équation aux valeurs propres (I.1) devient alors un problème séparable en $\vec{\rho}$ et en z . Les états enveloppe du Hamiltonien effectif idéal s'écrivent dans ce cas :

$$\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | n\vec{k} \rangle = \chi_n(z) \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} \quad (\text{I.3})$$

où S est la surface des couches et $\vec{k} = (k_x, k_y)$. La composante χ_n de la fonction d'onde enveloppe traduit du confinement spatial des porteurs le long de l'axe de croissance² tandis que la composante d'onde plane traduit de leur mouvement libre

2. Notons que les fonctions d'onde des états liés pour le mouvement suivant z ($E_n < V_b$) sont des fonctions réelles : $|\chi_n|^2 = \chi_n^2$.

dans le plan (x, y) . L'énergie correspondante de l'état (I.3) peut être écrite comme la somme de deux composantes :

$$\varepsilon_{n\vec{k}} = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (\text{I.4})$$

où E_n est l'énergie de l'état lié de sous-bande n pour le mouvement suivant z ($E_n < V_b$) et le second terme correspond à l'énergie cinétique de l'état $|n\vec{k}\rangle$ donnée par la dispersion parabolique.

Dans notre approche numérique, les états $\chi_n(z)$ et leur énergie E_n sont déterminés en résolvant l'équation de Schrödinger indépendante du temps suivant l'axe z :

$$\left[\vec{p}_z \frac{1}{2m^*(z)} \vec{p}_z + V_b(z) \right] \chi_n(z) = E_n \chi_n(z) \quad (\text{I.5})$$

avec $V_b(z) = V_b$ dans le matériau barrière et $V_b = 0$ dans le matériau puits de la structure. L'équation (I.5) est résolue numériquement par la méthode des matrices de transfert [52].

Le confinement unidimensionnel du système permet, par le contrôle des niveaux d'énergie E_n , d'ajuster la position des raies d'émission/absorption inter-sousbande de la structure. Ainsi, comme nous l'évoquons en section I.2 par un design approprié des épaisseurs de couche, il est possible de couvrir les domaines spectraux de l'IR, du moyen-IR ou encore du THz. Cette ingénierie de bandes est donc au coeur du développement des dispositifs optoélectroniques tels que les QWIP, QCD et LCQ. A titre d'exemple d'ajustabilité du spectre des énergies des hétérostructures quasi-2D, nous montrons sur la figure I.4 les quatre niveaux de sous-bande de la structure de double puits quantique 10 nm/2 nm/ L_2 d' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.43}\text{As}/\text{GaAs}_{0.51}\text{Sb}_{0.49}$ sur laquelle un champ électrique statique \vec{F}_{bias} est appliqué parallèlement à l'axe de croissance ($\vec{F}_{\text{bias}} = F_{\text{bias}}\hat{u}_z$, $F_{\text{bias}} = 12 \text{ kV.cm}^{-1}$).

Le graphe présenté est obtenu en faisant varier la largeur L_2 du second puits. Les largeurs du premier puits et de la barrière centrale restent quant à elles constantes. Les énergies E_n sont calculées en résolvant numériquement l'équation de Schrödinger (I.5) où le potentiel $V_{\text{bias}}(z) = eF_{\text{bias}}z$ induit par le champ statique appliqué est inclus dans le terme $V_b(z)$. Chaque alliage est traité à l'approximation de cristal virtuel (voir section I.5.2) donnant une hauteur de barrière de $V_b = 360 \text{ meV}$ ainsi que des masses effectives $m_w^* = 0.043m_0$ dans le matériau puits (InGaAs) et $m_b^* = 0.045m_0$ dans le matériau barrière (GaAsSb) [53].

Le spectre des énergies liées pour le mouvement suivant z est organisé en doublets. Ces doublets d'états résultent de l'hybridation des états propres de chaque puits. De plus, deux anti-croisements se distinguent nettement. Ceux-ci correspondent à la situation particulière où les états χ_1 et χ_3 , essentiellement localisés dans le puits de largeur 10 nm et d'énergies respectives E_1 et E_3 quasi-indépendantes de L_2 , s'hybrident respectivement avec les états χ_2 et χ_4 d'énergie décroissante en L_2 . Ceci se produit au voisinage de $L_2 \approx 10 \text{ nm}$ et de $L_2 \approx 12.5 \text{ nm}$. Dans ces deux cas, les états χ_3 et χ_4 (ou respectivement χ_1 et χ_2) sont délocalisés sur les deux puits de la structure, comme le montre la figure I.5. Enfin, à plus grande largeur L_2 , la localisation spatiale des états propres croît en augmentant l'épaisseur du puits.

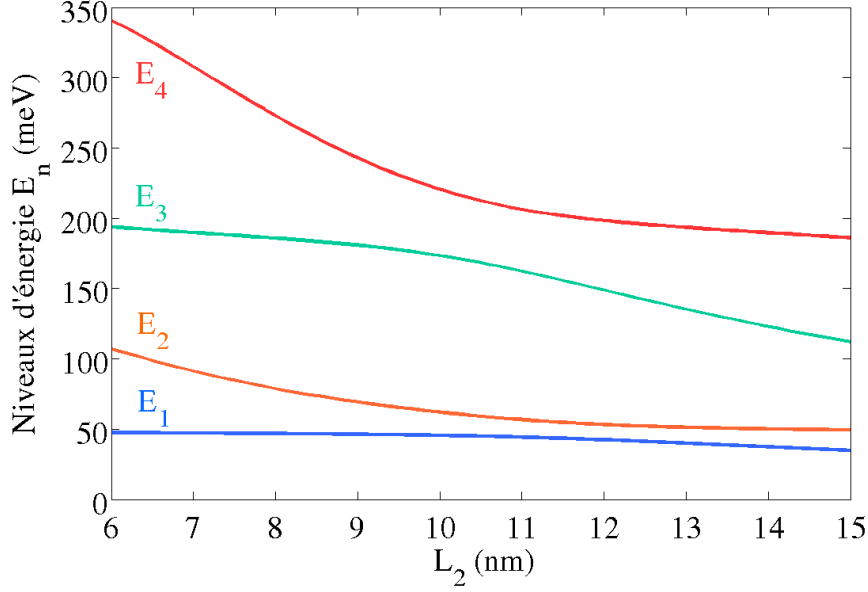


FIGURE I.4 – Variations des énergies propres de la structure 10 nm/2 nm/ L_2 d' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.43}\text{As}/\text{GaAs}_{0.51}\text{Sb}_{0.49}$ en fonction de la largeur de puits L_2 . Les paramètres de calcul sont : $m_w^* = 0.043m_0$, $m_b^* = 0.045m_0$, $V_b = 360$ meV et $F_{\text{bias}} = 12$ kV.cm $^{-1}$ [54]. Ces courbes ont été obtenues en résolvant l'équation (I.5) par dichotomie numérique où le champ \vec{F}_{bias} a été discrétisé le long de l'axe z .

Notons qu'une diminution de l'intensité du champ appliqué aura un effet similaire sur la localisation des fonctions d'onde enveloppe [55].

Jusqu'à présent, nous avons traité le cas de structures idéales qui, par nature, sont invariantes par translation suivant les directions x et y . Le calcul des états propres des structures réelles, c'est-à-dire en présence de diffuseurs ($V_{\text{dis}} \neq 0$), n'est pas aussi immédiat et fera l'objet des chapitres suivants. Néanmoins, les approches perturbatives, les résolutions numériques ou encore les approches diagrammatiques contribuent à une variété de méthodes de traitement du désordre. Au cours de notre étude, nous verrons que la prise en compte des diffuseurs ainsi que les approximations utilisées jouent un rôle essentiel dans la modélisation de telles hétérostructures, en particulier les LCQ THz.

I.4 Pertes optiques et absorption

Les structures à cascade quantique sont des dispositifs photoniques prometteurs pour l'émission et la détection dans la gamme THz. Cependant, dans ce domaine spectral, aucune émission laser n'a encore été observée à température ambiante et l'amélioration de ces structures fait l'objet d'une recherche soutenue. La figure I.6, extraite de l'article de revue de Sirtori *et al.* [6], présente les températures de fonctionnement maximales des LCQ THz (en mode pulsé) rapportées à ce jour. Bien que ces températures restent inférieures aux températures typiques des modules Peltier ($T \sim 230$ K), une nette progression a été faite au cours des douze dernières années. La décroissance brutale observée autour de 4-5 THz est due au fait que les énergies de photons tendent vers les énergies de phonons optiques (36 meV dans GaAs).

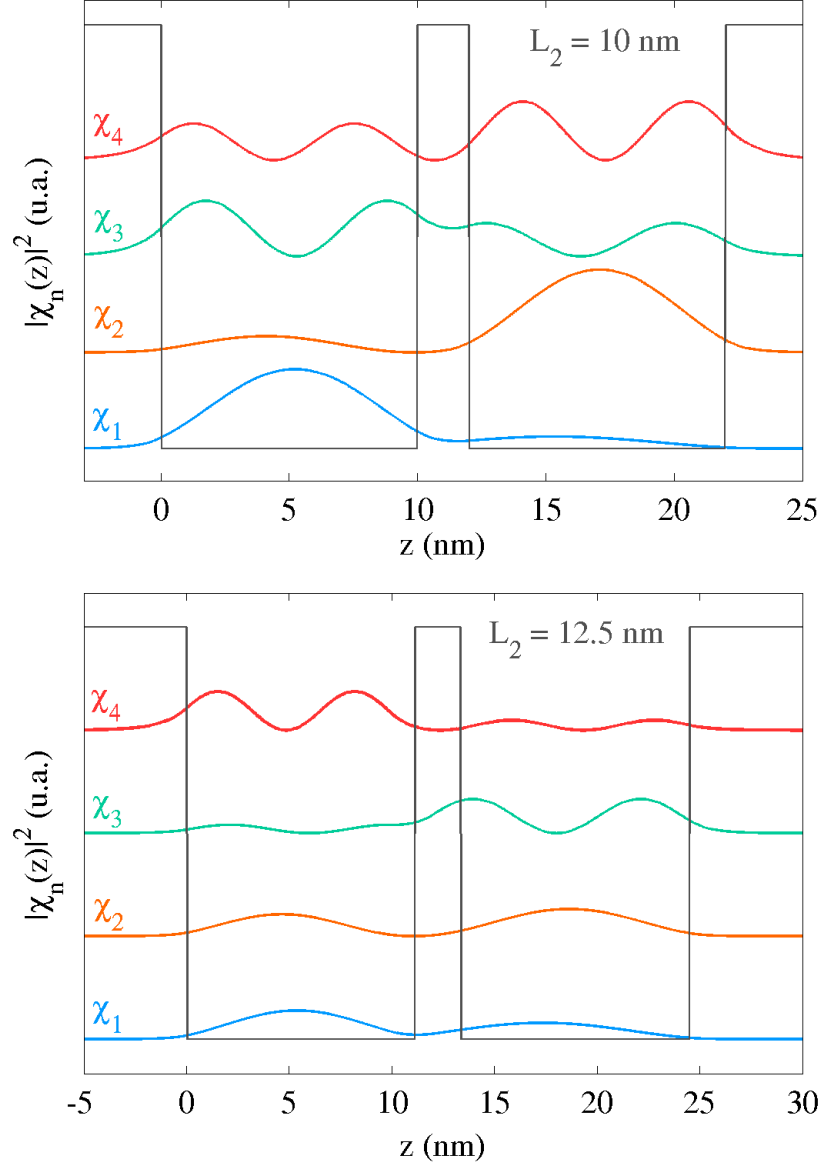


FIGURE I.5 – Profil de bande de conduction (trait continu gris) et modules carrés des fonctions d'onde χ_n , $n = 1, \dots, 4$ de la structure 10 nm/2 nm/ L_2 d' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.43}\text{As}/\text{GaAs}_{0.51}\text{Sb}_{0.49}$. Graphe supérieur : $L_2 = 10$ nm. Les états χ_3 et χ_4 sont délocalisés sur les deux puits quantiques de la structure. Cette situation correspond au premier anti-croisement de la figure I.4. Graphe inférieur : $L_2 = 12.5$ nm. Les états χ_1 et χ_2 sont délocalisés sur les deux puits quantiques de la structure. Cette situation correspond au second anti-croisement de la figure I.4.

La dégradation des performances des structures à cascade quantique est attribuée à une variété de phénomènes tels que les pertes optiques, la dissipation thermique [56] ou encore la saturation du gain laser [57]. L'optimisation de ces dispositifs passe certes par le développement de nouveaux designs mais aussi par une meilleure compréhension théorique des mécanismes de perte en vue d'une modélisation plus réaliste.

Parmi les processus de pertes optiques dans les LCQ, nous pouvons citer ces trois

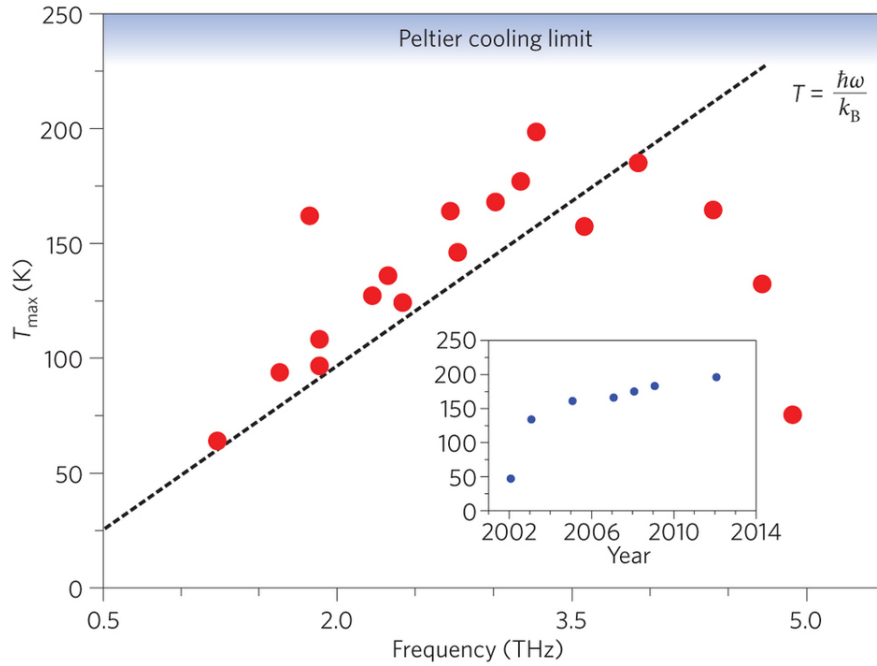


FIGURE I.6 – Températures de fonctionnement maximales des LCQ THz en mode pulsé répertoriées à ce jour (points rouges) en fonction de la fréquence du photon laser. La droite en pointillé représente la loi empirique d’évolution de ces températures. La déviation observée autour des fréquences de 4-5 THz s’explique par le fait que les énergies de photons tendent vers des valeurs égales à celles des phonons LO. Encart : évolution temporelle des températures de fonctionnement maximales des LCQ THz. Cette figure est extraite de la référence de Sirtori *et al.* [6].

principaux cas de figure :

- les photons laser sont absorbés par le milieu ambiant. Il s’agit ici des pertes que le mode laser subit à chaque réflexion sur les miroirs de la cavité, ou encore de l’absorption des photons par les porteurs du guide d’onde.
- les photons laser sont absorbés par les porteurs de la zone active. On distingue alors deux situations : l’absorption inter-sousbande résonante et l’absorption non résonante appelée aussi “absorption par porteurs libres”.
- les photons laser ne sont pas produits du tout à cause de l’échappement non radiatif des porteurs. Dans ce dernier cas, le niveau supérieur de la transition laser est dépeuplé par diffusion inter-sousbande des électrons.

Dans ce travail de thèse, nous nous sommes intéressée aux processus de pertes optiques ayant lieu dans la zone active uniquement, limitant ainsi nos considérations à des structures simples de quelques puits quantiques couplés (double ou triple puits asymétriques) pour la modélisation. Dans ce manuscrit, nous traiterons donc les deux derniers types de pertes optiques. L’absorption par porteurs libres et l’absorption inter-sousbande seront largement étudiées aux chapitres II et III et le chapitre IV sera consacré à la fuite non radiative des porteurs. Dans cette section, nous exposons quelques généralités sur l’absorption dans les hétérostructures quasi-2D et nous mettons en évidence son lien avec les différentes sources de diffusion.

Comme nous l'avons évoqué précédemment, une hétérostructure idéale est invariante par translation dans le plan (x, y) mais perd cette invariance le long de l'axe de croissance. En conséquence, il ne peut y avoir d'absorption de l'onde lumineuse si son vecteur polarisation est parallèle aux directions x ou y . Seule une onde polarisée suivant l'axe z peut induire des transitions optiques inter-sousbande. Ainsi, en présence d'une onde électromagnétique plane et progressive se propageant dans la direction \vec{q} , de champ électrique associé $\vec{E}_{\text{em}} = E_0 e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{u}$ et à la fréquence angulaire ω , l'élément de matrice dipolaire inter-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |n'\vec{k}'\rangle$ vaut :

$$\langle n'\vec{k}' | \vec{E}_{\text{em}} \cdot \vec{p} | n\vec{k} \rangle = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \left[\langle n' | p_z | n \rangle u_z + \hbar \delta_{n, n'} \vec{u} \cdot \vec{k} \right] E_0 e^{-i\omega t} \quad (\text{I.6})$$

à l'approximation dipolaire électrique. Cette relation démontre bien l'activation des transitions optiques par la polarisation suivant l'axe z . Notons qu'à ce stade, toute transition intra-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |n\vec{k}'\rangle$ avec l'absorption d'un photon d'énergie $\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k'^2 - k^2)$ et de vecteur d'onde $\vec{q} = (\vec{k}' - \vec{k})$, reste interdite pour toute polarisation puisque l'énergie et le vecteur d'onde ne peuvent être simultanément conservés. Par contre les transitions inter-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |n'\vec{k}'\rangle$ sont autorisées et produisent des raies d'absorption atomiques (fonctions delta) centrées à l'énergie $E_{n'} - E_n$ [40], comme le montre le schéma de gauche de la figure I.7.

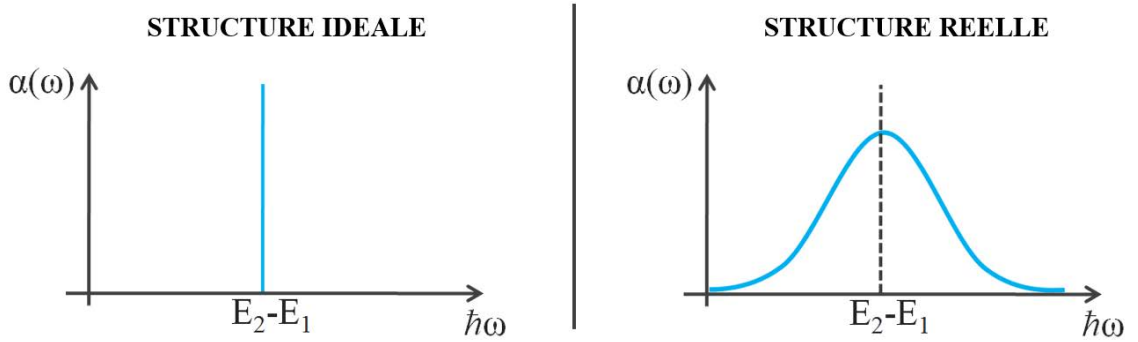


FIGURE I.7 – Schéma de la forme de raie d'absorption inter-sousbande $|1\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}\rangle$ d'une hétérostructure quasi-2D. Schéma de gauche : Cas d'une structure idéale. La raie d'absorption est une raie "atomique" delta centrée à l'énergie $E_2 - E_1$. Schéma de droite : Cas d'une structure réelle, les diffuseurs de la structure perturbent le mouvement des électrons dans le plan des couches de croissance et la raie d'absorption a une largeur finie. Cette largeur reflète directement l'influence des processus de diffusion.

Dans notre approche d'états enveloppe et en présence d'une onde électromagnétique polarisée le long de l'axe de croissance, nous devons inclure dans le Hamiltonien effectif H_{eff} (I.2) le terme d'interaction lumière-matière suivant (à l'approximation dipolaire [58]) :

$$H_{\text{light}} = -\frac{e\vec{E}_{\text{em}}}{2\omega} \left[\frac{1}{m^*(z)} \vec{p} + \vec{p} \frac{1}{m^*(z)} \right] \quad (\text{I.7})$$

Dans la suite du manuscrit, par analogie aux matériaux massifs, nous donnerons nos résultats en terme de coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ (exprimé en cm^{-1}). Pour cela, nous évaluons dans un premier temps le taux de perte d'énergie $P(\omega)$ en utilisant la

règle d'or de Fermi pour traiter l'interaction lumière-matière. Puis, en supposant que le champ électrique de l'onde électromagnétique est uniforme sur toute la longueur de la structure L_z [59], le coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ et le taux de perte $P(\omega)$ sont reliés par la relation :

$$\alpha(\omega) = \frac{2P(\omega)}{\varepsilon_0 c n_r E_{\text{em}} L_z S} \quad (\text{I.8})$$

Ainsi, comme démontré par l'équation (I.6), pour une structure idéale autant P_{intra} que α_{intra} disparaissent du bilan d'absorption tandis que :

$$\alpha_{\text{inter}}^{n \rightarrow n'}(\omega) = \frac{\pi e^2}{m^{*2} \omega \varepsilon_0 c n_r L_z} (N_1 - N_2) |\langle n' | p_z | n \rangle|^2 \delta(E_{n'} - E_n - \hbar\omega) \quad (\text{I.9})$$

où N_1 et N_2 sont respectivement les concentrations surfaciques d'électrons des sous-bandes n et n' et où nous avons négligé la dépendance en z de la masse effective³. Par ailleurs, à partir de la relation :

$$i \frac{p_z}{m^*} = \left[z, \frac{p^2}{2m^*} \right] \quad (\text{I.10})$$

l'expression du coefficient d'absorption (I.9) peut également être écrite en fonction de l'opérateur dipolaire inter-sousbande :

$$\alpha_{\text{inter}}^{n \rightarrow n'}(\omega) = \frac{\pi e^2 \omega}{\varepsilon_0 c n_r L_z} (N_1 - N_2) |\langle n' | z | n \rangle|^2 \delta(E_{n'} - E_n - \hbar\omega) \quad (\text{I.11})$$

Cette expression est équivalente à l'expression (I.9) et peut être alternativement obtenue en approximant le couplage lumière-matière par le terme $\vec{E} \cdot \hat{d}$ (où \hat{d} est le moment dipolaire électrique) au lieu du couplage $\vec{A} \cdot \vec{p}$ (où \vec{A} est le potentiel vecteur) que nous avons considéré jusqu'à présent.

Le cas des structures réelles, autrement dit désordonnées, est différent puisque le désordre perturbe le mouvement idéalement libre des porteurs dans le plan (x, y) . L'invariance par translation y est alors brisée et les niveaux électroniques discrets subissent un élargissement proportionnel à l'intensité du couplage au diffuseur [60]. Les échantillons réels présentent donc des raies d'absorption inter-sousbande de largeur finie [61, 62], comme le montre schématiquement le graphe de droite de la figure I.7.

La prise en compte empirique la plus courante des effets d'élargissement des niveaux consiste à transformer la fonction delta en une fonction lorentzienne dans le bilan d'absorption :

$$\alpha_{\text{inter}}^{n' \rightarrow n'}(\omega) = \frac{e^2 \omega}{\varepsilon_0 c n_r L_z} (N_1 - N_2) |\langle n' | z | n \rangle|^2 \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + (E_{n'} - E_n - \hbar\omega)^2} \quad (\text{I.12})$$

où la largeur Γ tient justement compte de tous les processus de diffusion. Cette approximation lorentzienne pour laquelle le facteur Γ est un paramètre phénoménologique est immédiate mais l'expression (I.12) présente néanmoins deux difficultés majeures. La première concerne l'identification incorrecte de la raie d'absorption avec

3. Dès lors que les états électroniques restent majoritairement localisés dans les puits de la structure, nous prenons en compte la masse effective des électrons dans le matériau puits.

l'écart non perturbé $E_{n'} - E_n$. En présence de désordre, cette différence d'énergie doit en principe comprendre les renormalisations des niveaux dues aux diffusions ou encore les éventuels décalages de polarisation et d'effets excitoniques [63–65]. La seconde difficulté concerne le statut du paramètre Γ . Celui-ci reste vague car il n'y a aucune prise en compte des mécanismes réels de diffusion, en particulier de leur dépendance en température ou encore en fonction de l'indice de bande. Des taux de diffusion semi-classiques sont généralement utilisés. Pourtant, cette approche peut-être problématique loin de la résonance, pour $|\hbar\omega - E_{n'} - E_n| \gg \Gamma$, où les pertes par porteurs libres dominent. De plus, nous verrons en section I.5 que les efficacités des différents diffuseurs sont fortement dépendantes de leurs positions dans la structure. Une compréhension complète des élargissements des niveaux par le désordre est donc hautement souhaitable dès lors que l'amélioration du design des structures à cascade est en jeu.

I.5 Désordre et sources de diffusion

Les diffuseurs de la structure brisent l'invariance par translation dans le plan des couches de croissance et perturbent le mouvement des électrons. Ils sont à l'origine de l'élargissement des niveaux électroniques et activent les transitions intra- et inter-sousbande non radiatives. Dans les hétérostructures à multi-puits quantiques couplés, la brisure de l'invariance par translation le long de l'axe de croissance entraîne d'importantes modifications des différents mécanismes de diffusion par rapport au cas du matériau massif. Les diffuseurs élastiques tels que les impuretés ionisées et le désordre d'alliage, bien que similaires à leurs équivalents dans les massifs, ont des efficacités de diffusion fortement dépendantes de la position des centres diffuseurs le long de l'axe z . Une autre différence majeure entre les matériaux massifs et les systèmes quasi-2D est l'existence d'un nouveau mécanisme de diffusion propre à l'alternance des couches de l'hétérostructure : la rugosité d'interface. En revanche, à part l'existence de modes de phonons supplémentaires tels que les modes d'interface, la diffusion par ces diffuseurs inélastiques dans une structure quasi-2D reste qualitativement similaire à celle du matériau massif. Dans la suite de cette section, nous introduisons une par une ces différentes sources de diffusion et présentons les différents potentiels de désordre que nous considérerons dans les chapitres qui suivent.

I.5.1 Impuretés ionisées

Dans les hétérostructures quasi-2D, tout comme dans les matériaux massifs, les impuretés ionisées peuvent avoir deux origines distinctes : les impuretés résiduelles du cristal et les impuretés donatrices introduites par le dopage. Les impuretés résiduelles dépendent intrinsèquement du type et de la qualité du matériau utilisé alors que les donneurs ionisés constituent une source de diffusion connue pour être efficace [63] et inévitable à cause de la nécessité d'introduire des porteurs supplémentaires dans la structure. Dans ce manuscrit, nous nous intéresserons exclusivement aux impuretés ionisées issues du dopage. Les expressions des potentiels exposées dans la suite ainsi que leurs dépendances en fonction des différents paramètres du système restent cependant valables pour une distribution d'impuretés résiduelles ; seul le signe du terme d'interaction varie suivant le cas où les impuretés sont des donneurs (interaction négative, potentiel attractif) ou accepteurs (interaction positive,

potentiel répulsif).

Afin de modéliser les donneurs, nous considérons une distribution de N_{imp} diffuseurs attractifs coulombiens répartis aléatoirement sur le plan (x, y) de surface S . Ainsi, pour un plan de dopage unique placé à la position $z = z_l$ dans l'hétérostructure, le potentiel de diffusion total généré par cette distribution d'impuretés s'écrit :

$$V_{\text{imp}}(\vec{\rho}, z) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \frac{1}{\sqrt{(\vec{\rho} - \vec{\rho}_j)^2 + (z - z_l)^2}} \quad (\text{I.13})$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide et ϵ_r la constante diélectrique relative du matériau. Comme nous allons calculer les éléments de matrice de diffusion, il est plus commode de considérer la transformée de Fourier-Bessel du potentiel coulombien (I.13) :

$$V_{\text{imp}}(\vec{Q}) = -\frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon_r S} \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \sum_{\vec{Q}} \frac{1}{Q} e^{-Q|z-z_l|} e^{i\vec{Q} \cdot (\vec{\rho} - \vec{\rho}_j)} \quad (\text{I.14})$$

où $\vec{Q} = (Q_x, Q_y)$. Les vecteurs $\vec{\rho}_j = (x_j, y_j)$ repèrent les positions des diffuseurs dans le plan (x, y) . Les coordonnées (x_j, y_j) sont des coordonnées aléatoires générées par notre code numérique. Par conséquent, le calcul de toute grandeur ou quantité physique qui dépend de ce potentiel de diffusion doit nécessairement contenir une moyenne sur un nombre suffisamment important de configurations aléatoires de désordre. En pratique, nous générons numériquement N couples de coordonnées aléatoires (x_j, y_j) et nous calculons la quantité physique en question pour chaque couple (x_j, y_j) . La valeur finale de la quantité en question est alors moyennée sur les N configurations aléatoires⁴.

Nous montrons sur la figure I.8 l'allure du potentiel de Coulomb effectif $V_{\text{imp}}(\vec{\rho})$ dans le plan des couches de la structure de double puits quantique 9/2/3 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75}. Le plan de dopage a été placé à la position $z_l = 3$ nm dans le puits le plus large de la structure où l'état fondamental χ_1 est essentiellement localisé. Le potentiel coulombien résulte de la distribution de 8 impuretés sur la surface $S = 200 \times 200$ nm². Pour obtenir ces graphes, le potentiel de Coulomb $V_{\text{imp}}(\vec{\rho}, z)$ (Eq. I.13) à trois dimensions a été moyenné sur l'état enveloppe χ_1^2 :

$$V_{\text{imp}}(\vec{\rho}) = \int dz \chi_1^2(z) V_{\text{imp}}(\vec{\rho}, z) \quad (\text{I.15})$$

Dès lors que l'on suppose des diffuseurs non corrélés, leurs positions aléatoires $\vec{\rho}_j$ disparaissent des calculs effectués à l'approximation de Born. En effet, lorsqu'un nombre relativement faible d'impuretés est distribué aléatoirement sur le plan (x, y) (distribution diluée de diffuseurs), les différents facteurs de phases $e^{i\vec{Q} \cdot \vec{\rho}_j}$ oscillent. Ainsi, sur plusieurs distributions d'impuretés, la valeur moyenne du module carré de $V_{\text{imp}}(\vec{Q})$ (Eq. I.14) ne dépend plus que du nombre d'impuretés :

$$N_{\text{imp}} = N_{\text{imp}} + \left\langle \sum_{i,j,i \neq j} e^{i\vec{Q} \cdot (\vec{\rho}_i - \vec{\rho}_j)} \right\rangle \approx \left\langle \sum_j e^{i\vec{Q} \cdot (\vec{\rho}_i - \vec{\rho}_j)} \right\rangle \quad (\text{I.16})$$

4. Les N configurations aléatoires de désordre sont issues de N tirages indépendants.

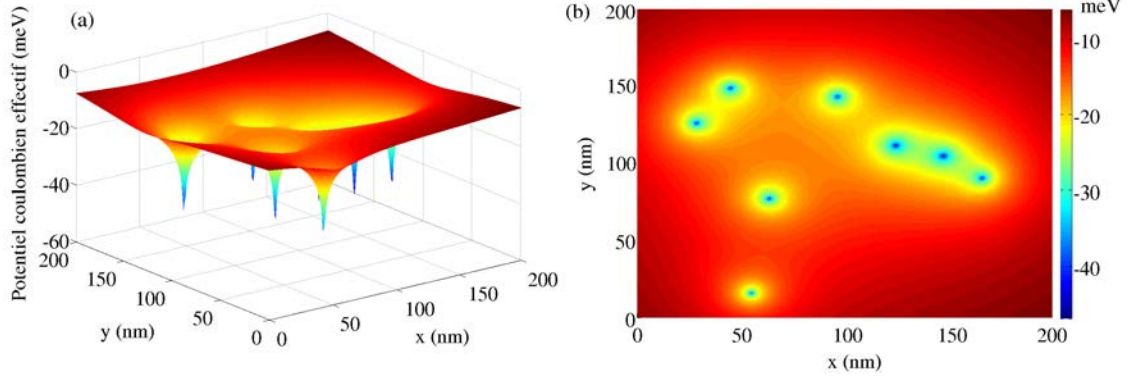


FIGURE I.8 – Allure du potentiel coulombien effectif (moyenné sur l'état enveloppe χ_1^2) dans le plan (x, y) de la structure 9/2/3 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75}. Ce potentiel est créé par une distribution aléatoire de 8 impuretés sur la surface $S = 200 \times 200$ nm², situé à la position $z_l = 3$ nm dans la structure. (a) Représentation du potentiel sur le plan des couches (x, y) . (b) Cartographie de la surface désordonnée (vue à deux dimensions).

Parallèlement, alors que dans le matériau massif il est inutile de préciser l'emplacement de la cellule unitaire qui contient les donneurs, dans une hétérostructure quasi-2D, il devient par contre fondamental de spécifier la position du (ou des) plan(s) de dopage par rapport aux états électroniques initiaux et finaux de la diffusion. Typiquement, la diffusion par impuretés sera plus efficace si la position z_l est proche du maximum du module carré des fonctions d'onde enveloppe de l'état final ou initial. Elle sera par contre négligeable si l'impureté est suffisamment "éloignée" des états impliqués dans la diffusion. Nous illustrons cette dépendance en calculant l'élément de matrice inter-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |n'\vec{k}'\rangle$ du potentiel de Coulomb créé par une impureté unique :

$$\langle n'\vec{k}' | V_{\text{imp}} | n\vec{k} \rangle = -\frac{e^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_r Sq} e^{i\vec{q}\cdot\vec{\rho}} \langle n' | e^{-q|z-z_l|} | n \rangle \quad (\text{I.17})$$

où $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ est la variation de vecteur d'onde au cours de la diffusion. Sur la figure I.9, nous montrons la variation de cet élément de matrice, ou plus précisément celle du facteur $\langle n' | e^{-q|z-z_l|} | n \rangle$, en fonction de la position z_l du plan de dopage pour plusieurs valeurs de q . La structure considérée pour ce calcul est le double puits quantique asymétrique 10/2/12 nm d'In_{0.53}Ga_{0.43}As/GaAs_{0.51}Sb_{0.49} et les états de sous-bande $n = 1$ et $n' = 2$ sont considérés. Ces graphes montrent que la position des impuretés le long de l'axe de croissance joue en effet un rôle important puisque le module carré de l'élément de matrice du potentiel de Coulomb (I.17) peut être soit très petit : c'est le cas d'une impureté éloignée des états et localisée dans les barrières latérales de la structure (pour $-5 \geq z_l \geq 0$ nm et $z_l \geq 24$ nm) ; soit peut atteindre une valeur maximale lorsque z_l est près d'un maximum de la fonction χ_1^2 ou χ_2^2 ($z_l \approx 5$ nm et $z_l \approx 18$ nm). Ces considérations sont pertinentes lorsque l'optimisation de la structure est engagée.

I.5.2 Désordre d'alliage

Comme dans le matériau massif, le désordre d'alliage dans une hétérostructure quasi-2D est une source de diffusion intrinsèque aux alliages utilisés. Dans une modé-

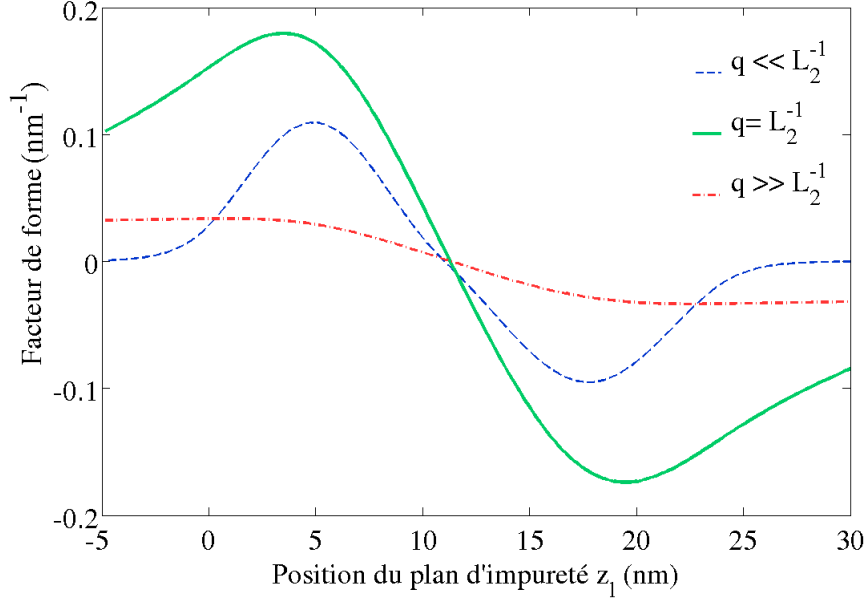


FIGURE I.9 – Variations du facteur de forme $\langle 2|e^{-q|z-z_l|}|1\rangle$ du potentiel de Coulomb à une impureté en fonction de la position z_l du plan de dopage dans la structure 10/2/12 nm d' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.43}\text{As}/\text{GaAs}_{0.51}\text{Sb}_{0.49}$ et pour trois valeurs de la variation q de vecteur d'onde : $q \ll L_2^{-1}$ (pointillé bleu), $q = L_2^{-1}$ (continu vert) et $q \gg L_2^{-1}$ (pointillé rouge). Les paramètres de calcul sont : $m_w^* = 0.067m_0$, $m_w^* = 0.045m_0$ et $V_b = 360$ meV. [66]

lisation simple, il résulte de la somme de diffuseurs non corrélés et de courte portée. Dans les alliages $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ du groupe III par exemple, chaque site du réseau est occupé par un atome de gallium Ga avec une probabilité x et par un atome d'aluminium Al avec la probabilité $(1-x)$. Si l'alliage est idéal, tous ces sites sont indépendants. De plus, les atomes Ga et Al étant isovalents, les liaisons chimiques entre les atomes Ga et As ou entre les atomes Ga et Al sont très similaires. Par conséquent, en première approximation, il est possible de définir un cristal virtuel où tous les sites des éléments du groupe III sont en moyenne occupés par des atomes qui contribuent au potentiel cristallin d'une quantité $(1-x)V_{\text{Ga}} + xV_{\text{Al}}$ [58]. La différence V_{alloy} entre le potentiel cristallin réel et le potentiel virtuel diffuse les ondes de Bloch dans le cristal. Ainsi, à cette approximation de cristal virtuel (VCA pour *Virtual Cristal Approximation*), le potentiel V_{alloy} est habituellement défini ainsi [67, 68] :

$$\begin{aligned} V_{\text{alloy}} &= \sum_{\vec{R}_{\text{Ga}}} x(V_{\text{Ga}} - V_{\text{Al}}) - \sum_{\vec{R}_{\text{Al}}} (1-x)(V_{\text{Ga}} - V_{\text{Al}}) \\ &= \Delta V \Omega_0 \left[x \sum_{\vec{R}_{\text{Ga}}} \delta(\vec{r} - \vec{R}_{\text{Ga}}) - (1-x) \sum_{\vec{R}_{\text{Al}}} \delta(\vec{r} - \vec{R}_{\text{Al}}) \right] \end{aligned} \quad (\text{I.18})$$

où $\vec{R}_{\text{Ga/Al}} = (\vec{\rho}_{\text{Ga/Al}}, z_{\text{Ga/Al}})$ sont les positions respectives des sites de Ga/Al, Ω_0 est le volume de la cellule unitaire du cristal VCA et où ΔV est la force effective du potentiel. Celle-ci est donnée par la moyenne du terme $(V_{\text{Ga}} - V_{\text{Al}})$ sur une cellule unitaire. Bien que la valeur de ΔV reste mal connue, il est courant de faire l'hypothèse que ce paramètre est relié à la discontinuité en bande de conduction V_b de la structure. Celle-ci s'élève généralement à une fraction d'eV [69, 70].

L'expression de l'élément de matrice de diffusion associé aux fluctuations de l'alliage découle de l'expression (I.18) :

$$|\langle n\vec{k}|\delta V_{\text{alloy}}|n'\vec{k}'\rangle|^2 = \left(\frac{\Delta V \Omega_0}{S} \right)^2 \left| x \sum_{\vec{R}_{\text{Ga}}} \chi_n(z_{\text{Ga}}) \chi_{n'}(z_{\text{Ga}}) e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{\rho}_{\text{Ga}}} - (1-x) \sum_{\vec{R}_{\text{Al}}} \chi_n(z_{\text{Al}}) \chi_{n'}(z_{\text{Al}}) e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{\rho}_{\text{Al}}} \right|^2 \quad (\text{I.19})$$

Dans l'expression (I.19), les deux sommes sont effectuées sur les zones $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ de l'hétérostructure. En moyennant sur les sites de Ga et Al et en supposant qu'il n'existe aucune corrélation entre ces sites, nous obtenons finalement :

$$\langle |\langle n\vec{k}|V_{\text{alloy}}|n'\vec{k}'\rangle|^2 \rangle_{av} = \frac{x(1-x)\Omega_0(\Delta V)^2}{S} \int_{\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}} dz \chi_n^2(z) \chi_{n'}^2(z) \quad (\text{I.20})$$

Comme pour les donneurs coulombiens, l'effet du désordre est fortement affecté par la quantification de la taille du système le long de l'axe de croissance. Ceci est dû à la distribution inégale des états enveloppe χ_n dans les différentes couches de la structure. Dans la plupart des hétérostructures, le désordre d'alliage contenu dans les barrières (zones où les états χ_n sont de faible amplitude) est significativement moins efficace que le désordre contenu dans les puits de la structure, là où les états sont majoritairement localisés. Nous illustrons cette dépendance sur la figure I.10 où les variations de l'élément de matrice $\langle M_{\text{alloy}} \rangle$, donné en (I.20), sont tracées en fonction de la longueur de la structure. Pour ce calcul, nous avons considéré un simple puits quantique de longueur L_z . Le matériau utilisé est l'alliage ternaire $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.43}\text{As}/\text{GaAs}_{0.51}\text{Sb}_{0.49}$ pour lequel le paramètre ΔV est supposé être le même pour les deux alliages et de valeur $\Delta V = 0.6$ eV [69, 70]. Sauf dans le cas limite où le puits quantique est tellement étroit que les densités de probabilité de présence électroniques sont comparables dans les barrières et dans le puits, l'efficacité du désordre d'alliage est réduite par le facteur de recouvrement des fonctions d'onde.

I.5.3 Rugosité d'interface

Dans les hétérostructures de semiconducteurs, la maîtrise des dimensions et de la géométrie des différents milieux est essentielle à l'ajustement des énergies des niveaux électroniques. Toutefois, la formation des interfaces n'est pas idéalement maîtrisée et l'alternance d'un matériau à l'autre n'est pas instantanée. Par conséquent, les interfaces ne sont pas lisses mais présentent des fluctuations d'un matériau dans l'autre. Ces fluctuations sont distribuées de façon aléatoire sur l'interface et ont une épaisseur d'au moins un plan atomique. Ces défauts, propres aux hétérostructures et présents seulement aux interfaces, constituent alors une source de diffusion inévitable pour les porteurs. La formation des interfaces reste un phénomène complexe et mal connu. Le développement de modèles de rugosité d'interface les plus simples possibles a donc fait l'objet de nombreuses recherches théoriques [71, 72]. Par ailleurs, notons que nous développons nos approches dans le formalisme de la fonction enveloppe mais dans une description plus microscopique de ces diffuseurs, l'interface (même si idéale) ne se réduit pas à un unique plan mais plutôt à une collection

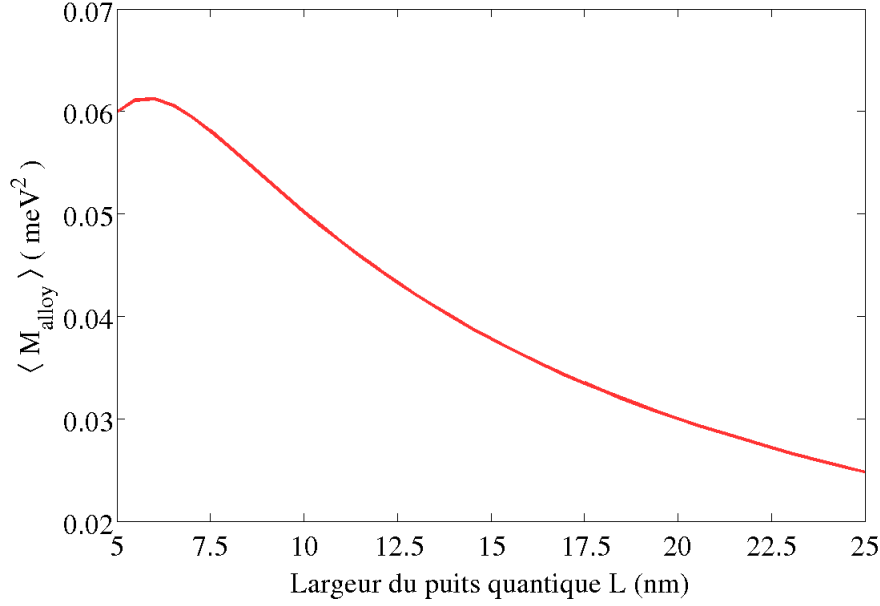


FIGURE I.10 – Evolution de l'élément de matrice effectif $\langle M_{\text{alloy}} \rangle = \langle |\langle 1\vec{k} | V_{\text{alloy}} | 2\vec{k}' \rangle|^2 \rangle_{av}$ en fonction de la longueur L_z de la structure de simple puits d' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.43}\text{As}/\text{GaAs}_{0.51}\text{Sb}_{0.49}$. Les paramètres de calcul sont : $m_w^* = 0.043m_0$, $m_b^* = 0.045m_0$, $V_b = 360$ meV et $\Delta V = 0.6$ eV.

d'atomes idéalement arrangés.

Un des modèles de désordre d'interface très fréquemment utilisé est celui qui relie le potentiel de désordre d'interface aux fluctuations corrélées de la position des défauts dans le plan des couches. Celui-ci est détaillé en [23] et [63]. Considérons alors la déviation $\Delta(\vec{\rho})$ de l'interface d'un plan. L'hétéro-interface nominale est située à la position z_0 et V_b désigne toujours la hauteur de barrière de la structure. Dans ces considérations, les électrons de la structure sont diffusés par le potentiel :

$$\begin{aligned} V(\vec{\rho}, z) &= V_b \Theta[z - z_0 + \Delta(\vec{\rho})] \\ &= V_b \Theta(z - z_0) + V_b \{\Theta[z - z_0 + \Delta(\vec{\rho})] - \Theta(z - z_0)\} \end{aligned} \quad (\text{I.21})$$

où $\Theta(x)$ est la fonction de Heaviside : $\Theta(x) = 1$ si $x > 0$ et $\Theta(x) = 0$ si $x < 0$. Ce potentiel de diffusion est ainsi écrit comme la somme des contributions non perturbées de l'interface idéale et des contributions de la perturbation :

$$V_{\text{def}}(\vec{\rho}, z) = V_b \{\Theta[z - z_0 + \Delta(\vec{\rho})] - \Theta(z - z_0)\} \quad (\text{I.22})$$

L'élément de matrice de désordre de cette perturbation entre deux états de sous-bande $|n\vec{k}\rangle$ et $|n'\vec{k}'\rangle$ est égal à :

$$\begin{aligned} \langle n\vec{k} | V_{\text{def}} | n'\vec{k}' \rangle &= \frac{V_b}{S} \int d^2\rho e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{\rho}} \int_{z_0 - \Delta(\vec{\rho})}^{z_0} dz \chi_n(z) \chi_{n'}(z) \\ &\approx \frac{V_b}{S} \chi_n(z_0) \chi_{n'}(z_0) \int d^2\rho e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{\rho}} \Delta(\vec{\rho}) \end{aligned} \quad (\text{I.23})$$

Les fluctuations $\Delta(\vec{\rho})$ ont une distribution à moyenne nulle. Par conséquent, aucun décalage des énergies n'existe au premier ordre en Δ .

Pour l'estimation des taux de diffusion, le module carré de l'élément de matrice (I.23) est moyenné :

$$\begin{aligned} \langle |\langle n\vec{k} | V_{\text{def}} | n'\vec{k}' \rangle|^2 \rangle_{\text{av}} &= \frac{V_b^2}{S} |\chi_n(z_0)|^2 |\chi_{n'}(z_0)|^2 \\ &\times \iint d^2\rho d^2\rho' e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot (\vec{\rho}' - \vec{\rho})} \langle \Delta(\vec{\rho}) \Delta(\vec{\rho}') \rangle_{\text{av}} \end{aligned} \quad (\text{I.24})$$

Dans ce modèle de rugosité d'interface, c'est donc la fonction de corrélation $\langle \Delta(\vec{\rho}) \Delta(\vec{\rho}') \rangle_{\text{av}}$ qui joue le rôle principal et très souvent l'hypothèse d'une fonction gaussienne de $(\vec{\rho}' - \vec{\rho})$ est considérée [63] :

$$\langle \Delta(\vec{\rho}) \Delta(\vec{\rho}') \rangle_{\text{av}} = \Delta^2 \exp \left(-\frac{(\vec{\rho}' - \vec{\rho})^2}{\Lambda^2} \right) \quad (\text{I.25})$$

Une description alternative consiste à considérer une distribution exponentielle des corrélations :

$$\langle \Delta(\vec{\rho}) \Delta(\vec{\rho}') \rangle_{\text{av}} = \Delta'^2 \exp \left(-\frac{|\vec{\rho}' - \vec{\rho}|}{\Lambda'} \right) \quad (\text{I.26})$$

Cette autre distribution a présenté de meilleurs ajustements avec les données expérimentales [73, 74]. Le calcul complet de l'élément de matrice (I.24) moyenné donne finalement pour le facteur de corrélation gaussien :

$$\langle |\langle n\vec{k} | V_{\text{def}} | n'\vec{k}' \rangle|^2 \rangle_{\text{av}} = \frac{V_b^2}{S} |\chi_n(z_0)|^2 |\chi_{n'}(z_0)|^2 \Delta^2 \pi \Lambda^2 \exp \left(-\frac{(\vec{k}' - \vec{k})^2 \Lambda^2}{4} \right) \quad (\text{I.27})$$

où les coefficients statistiques Δ et Λ sont généralement traités comme des paramètres d'ajustement. Notons que toute déformation du potentiel de confinement par les charges fixes et mobiles associées aux fluctuations d'interface a été négligée. Ando *et al.* ont discuté ces modifications en détail, en particulier dans le cas d'interfaces Si/SiO₂ [75]. Dans les structures à cascade quantique, il est cependant attendu que de telles variations soient très faibles car les concentrations en porteurs sont bien inférieures à celles des transistors Si MOSFET (généralement de l'ordre de 10^{12} cm^{-2} dans ces derniers).

Dans ce manuscrit, nous utiliserons un modèle de désordre d'interface légèrement différent. Par rapport à l'interface nominale $z = z_0$, les fluctuations de l'interface sont représentées ici par des protusions de forme gaussienne du matériau puits dans le matériau barrière ou vice versa. Comme le montre le schéma de la figure I.11, ces défauts sont alors deux types : attractifs dans le premier cas et répulsifs dans le second. Ces protusions sont centrées sur les sites $\vec{\rho}_j$. Elles sont caractérisées par leur extension σ dans le plan des couches et leur profondeur h_{def} (typiquement d'une à deux monocouches cristallines). A l'interface idéale barrière/puits ($z \leq z_0/z \geq z_0$), l'expression du potentiel de désordre s'écrit alors :

$$V_{\text{def}}(\vec{\rho}, z) = V_b f(z) \sum_{\vec{\rho}_j} \exp \left(-\frac{(\vec{\rho} - \vec{\rho}_j)^2}{2\sigma^2} \right) \quad (\text{I.28})$$

où :

$$f(z) = \begin{cases} + \Theta(z - z_0) \Theta(h_{\text{def}} - z + z_0) & (\text{défauts répulsifs}) ; \\ - \Theta(-z + z_0) \Theta(h_{\text{def}} + z - z_0) & (\text{défauts attractifs}) . \end{cases} \quad (\text{I.29})$$

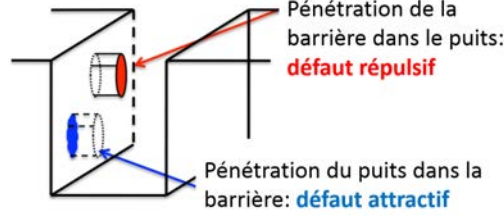


FIGURE I.11 – Schéma d'une hétéro-interface dans une hétérostructure quasi-2D. Les défauts d'interface proviennent de protusions du matériau puits dans le matériau barrière (défauts attractifs) et vice versa (défauts répulsifs). Dans notre modèle de rugosité d'interface, ces protusions ont des allures gaussiennes.

Le désordre d'interface dans son ensemble est caractérisé par la concentration surfacique des défauts :

$$n_{\text{def}} = \frac{N_{\text{att}} + N_{\text{rep}}}{S} \quad (\text{I.30})$$

où N_{att} et N_{rep} désignent respectivement le nombre de défauts attractifs et répulsifs à l'interface. De manière équivalente, nous pouvons définir la fraction f_{def} de la surface recouverte par les défauts :

$$f_{\text{def}} = \pi \sigma^2 n_{\text{def}} \quad (\text{I.31})$$

Ce paramètre a l'avantage d'être indépendant de la taille de l'échantillon. Comme pour la distribution d'impuretés ionisées de la section I.5.1, les distributions de défauts d'interface sont également aléatoires. L'estimation de toute quantité physique qui en dépend nécessite le même type de moyennage sur un grand nombre N de configurations aléatoires de désordre.

L'un des avantages de ce modèle réside dans le fait que les paramètres σ et f_{def} permettent d'avoir une représentation directe et intuitive de l'extension du désordre. Un autre avantage d'écrire V_{def} sous la forme d'une somme de potentiels gaussiens est lié à la capacité de pouvoir générer des états liés aux défauts d'interface. Néanmoins, ces états liés sont généralement peu profonds [76] (de l'ordre de 1 meV) dans les hétérostructures de GaAs/(Ga,Al)As car d'une part la profondeur des défauts h_{def} est faible (typiquement une monocouche, $h_{\text{def}} = 2.83 \text{ \AA}$) et d'autre part l'amplitude des fonctions d'onde aux interfaces est généralement elle aussi relativement faible. Les propriétés de ces états particuliers seront étudiées aux chapitres III et IV.

La rugosité d'interface n'affecte pas les différentes sous-bandes de la même manière puisque l'amplitude des fonctions d'onde aux interfaces dépend de l'indice de sous-bande. Par analogie à la figure I.8, nous montrons sur la figure I.12 les variations dans le plan (x, y) du potentiel de désordre d'interface dans un double puits quantique 9/2/3 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75}. Pour obtenir les graphes de cette figure, le potentiel de désordre à trois dimensions a été moyenné sur l'état enveloppe χ_1^2 :

$$V_{\text{def}}(\vec{\rho}) = \int dz \chi_1^2(z) V_{\text{def}}(\vec{\rho}, z) = -V_b \left[\int_{z_0}^{z_0+h_{\text{def}}} dz \chi_1^2(z) \sum_{\vec{\rho}_{\text{att}}} \exp \left(-\frac{(\vec{\rho} - \vec{\rho}_{\text{att}})^2}{2\sigma^2} \right) + \int_{z_0-h_{\text{def}}}^{z_0} dz \chi_1^2(z) \sum_{\vec{\rho}_{\text{rep}}} \exp \left(-\frac{(\vec{\rho} - \vec{\rho}_{\text{rep}})^2}{2\sigma^2} \right) \right] \quad (\text{I.32})$$

Les graphes de la figure I.12 correspondent à une configuration aléatoire donnée de désordre d'interface.

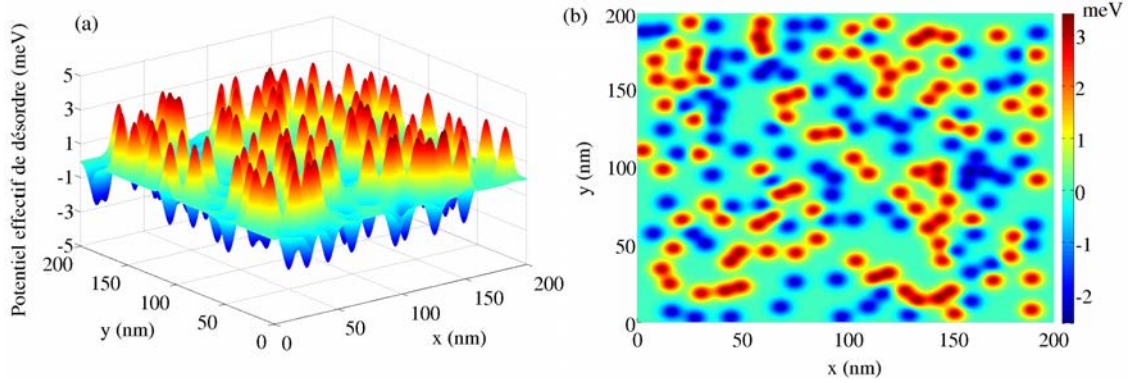


FIGURE I.12 – Allure du potentiel effectif de désordre d'interface (moyenné sur l'état χ_1^2) dans le plan (x, y) de la structure 9/2/3 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75}. Les paramètres de désordre sont : $\sigma = 3.6$ nm, $h_{\text{def}} = 2.83$ Å et $f_{\text{def}} = 0.30$, soit 172 défauts répartis sur l'interface $z_0 = 9$ nm ($N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = 86$). (a) Représentation du potentiel sur le plan des couches (x, y) . (b) Cartographie de la surface désordonnée (vue à deux dimensions).

Le lien entre ce modèle de désordre d'interface et le modèle précédent basé sur les corrélations, peut être fait en évaluant le module carré de l'élément de matrice de diffusion moyen. En supposant qu'il n'y a aucune corrélation entre les défauts attractifs et les répulsifs, celui-ci donne :

$$\begin{aligned} \langle |\langle n\vec{k} | V_{\text{def}} | n'\vec{k}' \rangle|^2 \rangle_{\text{av}} &= \frac{4\pi^2 V_b^2 \sigma^4}{S} e^{-\sigma^2 (\vec{k}' - \vec{k})^2} \\ &\times \left(\frac{N_{\text{rep}}}{S} \left| \int_{z_0}^{z_0+h_{\text{def}}} dz \chi_n(z) \chi_{n'}(z) \right|^2 + \frac{N_{\text{att}}}{S} \left| \int_{z_0-h_{\text{def}}}^{z_0} \chi_n(z) \chi_{n'}(z) \right|^2 \right) \quad (\text{I.33}) \end{aligned}$$

Dans la limite où les fonctions enveloppe varient lentement sur l'échelle du paramètre h_{def} , nous obtenons alors :

$$\langle |\langle n\vec{k} | V_{\text{def}} | n'\vec{k}' \rangle|^2 \rangle_{\text{av}} = \frac{4\pi^2 V_b^2 \sigma^4 h_{\text{def}}^2}{S} |\chi_n(z_0)|^2 |\chi_{n'}(z_0)|^2 \left(\frac{N_{\text{rep}} + N_{\text{att}}}{S} \right) e^{-\sigma^2 (\vec{k}' - \vec{k})^2} \quad (\text{I.34})$$

Ainsi, en comparant les expressions (I.27) et (I.34), l'équivalence suivante est obtenue :

$$\Lambda = 2\sigma \quad ; \quad \Delta = h_{\text{def}} \sqrt{f_{\text{def}}} \quad (\text{I.35})$$

Pour conclure, notons qu'il est attendu que la rugosité d'interface joue un rôle plus important dans les systèmes où les anions sont différents comme par exemple les composés ternaires de type InAs/(Ga,Al)Sb ou encore (Ga,In)As/Ga(As,Sb). Ceci est dû au fait que la croissance par épitaxie par jet moléculaire de telles couches s'achève toujours sur un plan de l'élément V. Par conséquent, dans un simple puits d'AlSb/InAs/AlSb par exemple, la croissance de la barrière s'arrête par un plan de Sb. Ensuite, la croissance de la couche d'InAs commence, laissant une double couche d'InSb entre les couches d'AlSb et d'InAs. La croissance de la couche d'InAs

s'arrête alors sur un plan d'As. Celle de la seconde barrière laisse donc une double couche d'AlAs entre les couches d'InAs et d'AlSb. La structure atomique de ces doubles couches reste mal connue, tout comme la structure d'un défaut d'interface qui est probablement plus complexe que dans les éléments plus communs du groupe V. Intuitivement, celui-ci doit probablement avoir une profondeur plus importante que celle trouvée dans GaAs/(Ga,Al)As. Dans la suite, nous avons tenu compte empiriquement de cet effet en supposant dans nos calculs sur les structures sans anion commun que la profondeur des défauts était d'au moins deux monocouches.

I.5.4 Phonons

Tandis que les impuretés ionisées, le désordre d'alliage et la rugosité d'interface contribuent à la diffusion élastique des porteurs, les phonons, modes de vibration du réseau cristallin, constituent les principaux diffuseurs inélastiques [77]. La diffusion des électrons de la structure par les phonons peut être analysée suivant la même démarche que celle des diffuseurs statiques.

Dans les matériaux polaires tels que GaAs/(Ga,Al)As, l'interaction électron-phonon est décrite par le terme suivant [78] :

$$H_{\text{e-phonon}} = \sum_{\vec{q}, q_z} \left[v(\vec{q}, q_z) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} e^{-iq_z z} b_{\vec{q}, q_z}^\dagger + v^*(\vec{q}, q_z) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} e^{iq_z z} b_{\vec{q}, q_z} \right] \quad (\text{I.36})$$

Ce terme décrit le couplage des états électroniques au réservoir d'états bosoniques de phonons. Dans l'expression (I.36), l'opérateur $b_{\vec{q}, q_z}^\dagger$ est l'opérateur bosonique de création d'un phonon dans le mode $\vec{Q} = (\vec{q}, q_z)$ et $b_{\vec{q}, q_z}$ est l'opérateur de destruction correspondant. Dans la suite du manuscrit, nous considérerons deux types de phonons présents dans l'hétérostructure : les phonons acoustiques longitudinaux (phonons LA) et les phonons optiques longitudinaux (LO). La force effective $v(\vec{q}, q_z)$ de l'interaction dépend de la nature du phonon.

Dans le cas de phonons LO et dans les matériaux polaires comme GaAs, la force effective $v(\vec{q}, q_z)$ est aussi appelée "terme de Fröhlich" et vaut :

$$|v_{\text{LO}}(\vec{q}, q_z)|^2 = \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_{\text{LO}}}{\varepsilon_p \Omega Q^2} \quad (\text{I.37})$$

avec $\varepsilon_p^{-1} = \varepsilon_r(\infty)^{-1} - \varepsilon_r^{-1}$ où $\varepsilon_r(\infty)$ est la constante diélectrique à haute fréquence. Dans le cas de phonons LA, l'approximation de potentiel de déformation donne :

$$|v_{\text{LA}}(\vec{q}, q_z)|^2 = \frac{C_0}{\Omega} \hbar \omega(\vec{Q}) \quad (\text{I.38})$$

où Ω est le volume de l'échantillon ($\Omega = L_z \times S$) et où :

$$C_0 = \frac{D^2}{2\rho c_s^2} \quad (\text{I.39})$$

avec D le potentiel de déformation, ρ la densité et c_s la vitesse longitudinal du son dans le matériau.

Pour les deux expressions (I.37) et (I.38), nous négligerons les modifications possibles du spectre des états phononiques liés à l'hétérostructure elle-même. Autrement dit, nous prenons en compte des branches de phonons optiques plates d'énergie constante $\hbar\omega_{\text{LO}}$, ainsi que des branches de phonons acoustiques isotropes et linéaires dont la pente correspond à la vitesse du son. Ces considérations reviennent à se placer au voisinage du centre de la première zone de Brillouin pour les dispersions phononiques (états de faible vecteur d'onde \vec{Q} , voir figure I.13).

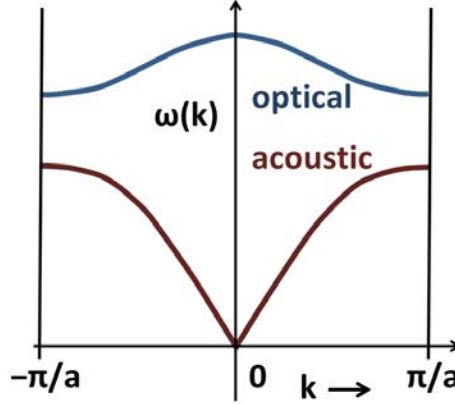


FIGURE I.13 – Dispersions des états phononiques longitudinaux optiques et acoustiques au sein de la première zone de Brillouin. Sur ce graphe, k désigne la variable Q de nos notations.

Enfin, contrairement aux diffuseurs statiques, l'efficacité de la diffusion par phonons ne dépend d'aucune position spécifique. En revanche, cette efficacité est fortement contrôlée par la température du réseau : les états phononiques sont davantage activés à haute température et tendent alors à dominer la diffusion des porteurs[77].

I.6 Conclusion

Les techniques de croissance actuelles telles que l'épitaxie par jet moléculaire et l'épitaxie en phase vapeur ont rendu possible la croissance de couches de semiconducteurs nanométriques dont les interfaces sont relativement bien contrôlées. Grâce aux avancées de ces procédés de nanofabrication, toute une gamme d'hétérostructures a été développée, s'étendant des structures à simple puits quantique comprenant uniquement deux interfaces, à des séquences plus complexes de plusieurs centaines de puits couplés.

Dans ce premier chapitre, nous nous sommes intéressée à l'une des plus élaborées d'entre elles : le LCQ. Nous avons tout d'abord présenté quelques généralités sur la structure et l'émission de ces lasers et nous avons montré que ceux-ci se distinguent des lasers inter-bande conventionnels de par leur unipolarité et leur périodicité. Ces deux caractéristiques permettent, entre autres, d'obtenir de meilleurs rendements (un seul électron émet N_p photons grâce à l'effet de cascade) et, par un choix judicieux des épaisseurs de couche, de couvrir une gamme spectrale étendue du moyen IR jusqu'au THz. Ces émetteurs à cascade quantique sont donc des dispositifs très

prometteurs pour lesquels de nombreuses applications potentielles découlent. Cependant, une variété de phénomènes de pertes limitent toujours leur performances et ces dispositifs restent encore à améliorer.

Nous avons détaillé ces différentes sources de dégradation en mettant l'accent sur les pertes optiques de la zone active. Souvent traités à l'approximation lorentzienne, approximation qui apporte une description vague et incomplète, ces processus sont directement reliés aux sources de diffusion présentes dans la structure. Une compréhension détaillée de ces mécanismes de pertes et de diffusion est pourtant indispensable à une modélisation réaliste des LCQ. Ce travail de thèse s'inscrit donc dans ce contexte d'optimisation des structures à cascade quantique, en particulier les LCQ, et dans les chapitres suivants, nous proposons deux approches théoriques de l'absorption par porteurs libres et des taux de diffusion dans les structures à cascade quantique.

Chapitre II

Absorption par porteurs libres

II.1 Introduction

Comme nous l'évoquions au chapitre I, parmi les différentes sources possibles de dégradation des performances des LCQ, la dépopulation des niveaux laser par échappement non radiatif des porteurs et la réabsorption des photons peuvent jouer un rôle important et restent des sujets largement étudiés [79–83].

L'absorption des photons laser est un mécanisme de pertes inévitable à cause des porteurs libres de la structure. Les porteurs impliqués dans le processus d'inversion de population, c'est-à-dire situé sur la sous-bande supérieure de la transition radiative sont les plus efficaces. Grâce à l'énergie du photon absorbé, il est alors possible pour l'électron d'effectuer des transitions intra- ou inter-sousbande, toutes deux obliques dans l'espace des vecteurs d'onde \vec{k} . Du fait de la conservation simultanée de l'énergie et du vecteur d'onde \vec{k} , de telles les transitions obliques nécessitent l'assistance d'un diffuseur de la structure. Bien qu'interdites dans une structure idéale à cause de l'invariance par translation dans le plan des couches de croissance, elles sont alors activées par le désordre dans les structures réelles.

L'absorption par porteurs libres est bien documentée dans le cas des matériaux massifs pour lesquels une approche quantique de calcul [84] conduit à un coefficient d'absorption proche du résultat semi-classique de Drude [49, 85–88]. Cette approche quantique prédit une dépendance des pertes par porteurs libres en ω^{-p} , où $p \approx 2 - 3$ et où ω est la fréquence angulaire de l'onde laser. Ce processus d'absorption est connu dans les lasers inter-bande conventionnels pour être d'une efficacité limitée justement en raison des courtes longueurs d'onde d'émission. Au contraire, dans le cas des lasers inter-sousbande tels que les LCQ, ce phénomène devrait être bien plus important. Cependant, l'extrapolation très couramment employée du modèle de Drude aux LCQ conduit à une absorption par porteurs libres comparable au gain laser réel [48, 89, 90]. Une telle absorption remettrait considérablement en cause l'usage futur des LCQ.

Outre l'approche de Drude, il a été montré que dans les LCQ émettant dans le moyen infrarouge, l'absorption par porteurs libres apportait une faible contribution aux pertes totales réelles du laser [91]. Une autre estimation de l'absorption par porteurs libres induit par les défauts d'interface dans des puits quantiques uniques prédit également un coefficient d'absorption faible [92]. Enfin, d'autres calculs simi-

lares ont été effectués pour des structures quasi-2D en présence de phonons optiques et acoustiques [93, 94].

Dans ce deuxième chapitre, nous reprendrons dans un premier temps l'approche semi-classique de Drude et nous montrerons que l'extrapolation d'un tel modèle aux LCQ présente une difficulté conceptuelle due à la configuration géométrique du système. Nous soulignerons ainsi la nécessité de développer une nouvelle approche théorique d'estimation des pertes, fondée cette fois-ci sur des hypothèses quantiques. Dans un second temps, nous détaillerons notre propre modèle d'absorption par porteurs libres dans les LCQ, reposant sur un développement perturbatif des états électroniques idéaux au premier ordre du potentiel de diffusion. Nous traiterons en détail le cas des diffuseurs élastiques présents dans l'hétérostructure tels que les défauts d'interface, les impuretés ionisées et le désordre d'alliage, ainsi que des diffuseurs inélastiques tels que les phonons optiques et acoustiques. Nous discuterons en particulier de la contribution relative de ces différents mécanismes de diffusion et de l'évolution en température des pertes par porteurs libres. Nous conclurons finalement ce chapitre par la comparaison de l'absorption en configuration de polarisation standard des LCQ (champ électrique de l'onde électromagnétique parallèle à l'axe de croissance) avec la polarisation dans le plan des couches de croissance. Nous montrerons que pour cette dernière, un comportement "à la Drude" est retrouvé, soulignant ainsi une nette anisotropie de l'absorption par porteurs libres en fonction de la polarisation considérée.

II.2 Modèle de Drude

L'absorption par porteurs libres est bien documentée pour le cas des matériaux massifs. La méthode la plus simple de tenir compte des transitions obliques impliquées est d'y appliquer le modèle semi-classique de Drude [49, 88].

Considérons un matériau massif illuminé par une onde plane électromagnétique progressive caractérisée par son vecteur d'onde \vec{q} et sa fréquence angulaire ω . Dans la représentation semi-classique, le champ électrique $\vec{E}_{\text{em}}e^{-i\omega t}$ de l'onde incidente accélère les électrons de conduction qui sont également ralentis par la force de frottement $-m^*\frac{\vec{v}}{\tau}$ résultant des processus de collision. Le temps τ désigne alors le temps de relaxation caractéristique des porteurs et $\vec{v} = \vec{v}_0e^{-i\omega t}$ leur vitesse. Dans cette considération, l'équation semi-classique du mouvement de l'électron est :

$$m^*\frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E}_{\text{em}}e^{-i\omega t} - m^*\frac{\vec{v}}{\tau} \quad (\text{II.1})$$

où $-e$ est la charge élémentaire de l'électron. La vitesse des porteurs peut alors être déduite de l'équation (II.1) :

$$\vec{v}_0 = \frac{-e\tau\vec{E}_{\text{em}}}{m^*(1 - i\omega\tau)} \quad (\text{II.2})$$

En régime permanent, les deux forces de (II.1) se compensent et la vitesse de l'électron devient proportionnelle au champ électrique. Ceci conduit alors à la loi d'Ohm reliant le courant \vec{J} et la conductivité $\sigma(\omega)$:

$$\vec{J}(\omega) = \sigma(\omega)\vec{E}_{\text{em}}(\omega) \quad (\text{II.3})$$

Dès lors que $\vec{J} = n_{3D}e\vec{v}_0$ où n_{3D} est la densité électronique volumique du matériau, la conductivité $\sigma(\omega)$ vaut donc :

$$\sigma(\omega) = \frac{n_{3D}e^2\tau}{m^*(1 - i\omega\tau)} = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau} \quad (\text{II.4})$$

où $\sigma_0 = \frac{n_{3D}e^2\tau}{m^*}$ est la conductivité statique du matériau. Le coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ est alors défini par :

$$\alpha(\omega) = \frac{\text{Re}[\sigma(\omega)]}{n_r\epsilon_0 c} \quad (\text{II.5})$$

où n_r est l'indice de réfraction à la fréquence angulaire ω et c est la célérité de la lumière. Dans la limite où $\omega\tau \gg 1$, le coefficient d'absorption vaut finalement :

$$\alpha(\omega) = \frac{n_e e^2}{m^* n_r \epsilon_0 c \omega^2 \tau} \quad (\text{II.6})$$

Le modèle semi-classique de Drude prédit ainsi un coefficient d'absorption $\alpha \propto \lambda^2$ ($\alpha \propto \omega^{-2}$) où λ est la longueur d'onde de l'onde incidente. Pour des paramètres typiques du matériau GaAs massif ($m^* = 0.07m_0$, $n_{3D} = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $n_r = 3.5$ et $\tau = 1 \text{ ps}$), une valeur de $\alpha \approx 0.12 \text{ cm}^{-1}$ est obtenue à une longueur d'onde de $\lambda = 10 \text{ }\mu\text{m}$. Cette valeur est en réalité d'un facteur 3 supérieure à celle obtenue par une méthode plus précise consistant à résoudre l'équation de Boltzmann et à évaluer le paramètre phénoménologique τ [15]. A ce stade, il est évident que l'approche semi-classique de Drude a des limites, d'une part d'un point de vue physique puisqu'elle n'apporte aucune description quantique du système, mais aussi numérique puisqu'il n'y a *a priori* aucune connaissance du paramètre τ et *a fortiori* de ses variations avec la longueur d'onde λ ou encore avec la température T .

Une approche microscopique du problème consiste à résoudre l'équation de Boltzmann pour laquelle les probabilités de diffusion de l'électron sont déduites des éléments de matrice quantiques du potentiel de désordre. Ou bien, il est aussi possible de déterminer la dépendance en fréquence de la conductivité, seul ingrédient à introduire dans les équations de Maxwell, par des techniques de calculs diagrammatiques impliquant les fonctions de Green [17]. A l'ordre le plus bas du petit paramètre $\omega\tau$, une expression similaire à (II.6) est alors retrouvée mais avec une amélioration théorique importante : le paramètre phénoménologique τ est désormais une quantité bien définie qui peut être précisément calculée en fonction des paramètres de bande, de température, des défauts ou encore des phonons présents dans le matériau. Les calculs basés sur les équations de Boltzmann démontrent un comportement en λ^p avec un exposant p qui dépend du mécanisme de diffusion : $p \approx 2.5$ pour une diffusion par phonons optiques, $p \approx 3.5$ pour les impuretés ionisées et $p \approx 1.5$ pour les phonons acoustiques [15].

La figure II.1 montre une estimation de l'absorption par porteurs libres dans les semiconducteurs massifs. Le matériau considéré est GaAs et la température est fixée à $T = 300 \text{ K}$. Le coefficient d'absorption à la longueur d'onde $\lambda = 10 \text{ }\mu\text{m}$ est tracé en fonction de la concentration en électron n_{3D} . Plusieurs mécanismes de diffusion ont été considérés : les impuretés ionisées (α_{imp}), les interactions électron-phonon LO (α_{op}) ainsi que les interactions électron-phonon LA (α_{ac}). La théorie et les données expérimentales s'accordent quantitativement sur la valeur du coefficient

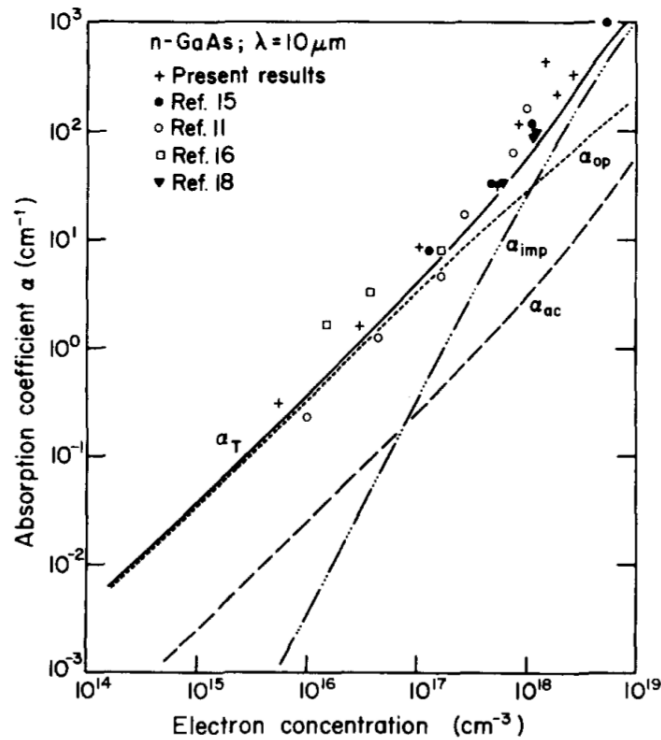


FIGURE II.1 – Valeurs théoriques et expérimentales du coefficient d'absorption en fonction de la concentration électronique dans GaAs massif à 300 K. Figure extraite de la référence [15].

d'absorption à $\lambda = 10 \mu\text{m}$ ainsi que sur ses variations en fonction de la densité n_{3D} .

Le cas des hétérostructures quasi-2D telles que les structures à cascade quantique est néanmoins plus complexe. Dans le cas d'un LCQ, les règles de sélection optiques imposent une direction de polarisation du champ émis le long de l'axe de croissance z de la structure. Les états de conduction quant à eux, sont quasi-2D. Ils possèdent une composante liée décrivant le confinement le long de la direction z introduit par la structure elle-même, et une composante étendue dans le plan des couches, suivant les directions x et y (Eq. I.3). Comme le montre la figure II.2, une difficulté conceptuelle à l'application du modèle de Drude à de tels systèmes découle immédiatement de cette configuration puisque le mouvement libre des porteurs a lieu uniquement dans le plan perpendiculaire au champ électrique de l'onde électromagnétique, rendant alors impossible toute accélération des porteurs par la force électrique, comme exprimé dans l'équation du mouvement semi-classique (II.1). Cette remarque implique donc que l'estimation des pertes par porteurs libres à partir du modèle de Drude, certes valide pour les matériaux massifs, reste sérieusement discutable dans le cas d'hétérostructures quasi-2D. Notons par ailleurs que la dépendance $\alpha(\omega) \approx \omega^{-p}$ avec $p \sim 2 - 3$ de ce modèle semi-classique prédit un coefficient d'absorption de l'ordre de 10^2 cm^{-1} pour un LCQ à 2 THz [17], c'est-à-dire comparable aux gains laser réels, remettant alors sérieusement en question l'efficacité et l'usage futur des LCQ [48, 89, 90].

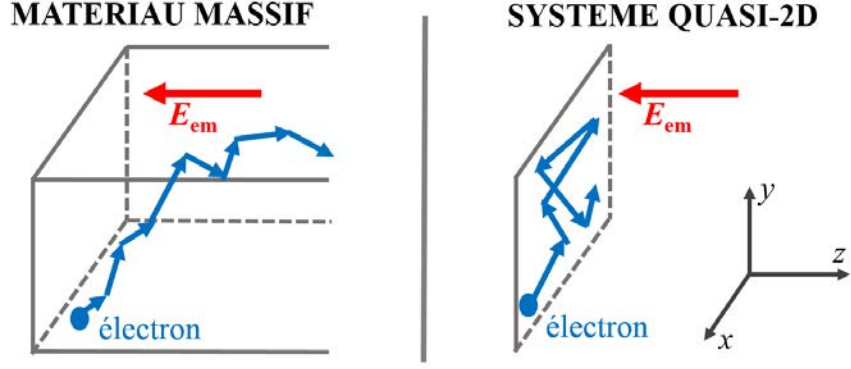


FIGURE II.2 – Schéma des différentes configurations du mouvement semi-classique des électrons en présence du champ électrique de l'onde électromagnétique dans les matériaux massifs (panneau de gauche) et les systèmes quasi-2D (panneau de droite).

II.3 Description quantique : approche perturbative

Comme nous l'avons évoqué en introduction, l'absorption par porteurs libres est intrinsèquement connectée au processus de diffusion intra- et inter-sousbande. Une description quantitative de ceux-ci est par conséquent nécessaire pour une estimation quantitative des pertes. La transition optique a lieu entre deux états de sous-bande à une différence d'énergie égale à celle du photon absorbé $\hbar\omega$ [95]. La différence d'énergie entre $\hbar\omega$ et l'espacement entre les deux sous-bandes est alors compensée par un changement d'énergie cinétique dans le plan des couches, apporté par un diffuseur de la structure. Dans la suite de ce chapitre, nous présentons notre modèle pour l'estimation des pertes par porteurs libres reposant sur une description perturbative de ces transitions intra- et inter-sousbande obliques, nécessairement assistées par le désordre.

II.3.1 Modèle théorique et mécanisme

Afin de décrire notre approche perturbative pour l'estimation des pertes par porteurs libres, nous considérons une structure à cascade quantique simple comprenant N_p périodes, chacune de largeur L_z . La région active de chaque période est composée d'une structure asymétrique à multi-puits quantiques ayant N états liés pour le mouvement suivant z , notés E_n où $n = 1, 2, \dots, N$ est l'indice de sous-bande. Les états électroniques de chaque période sont considérés comme étant indépendants de ceux de la période suivante. Ainsi, notre étude sera restreinte à la zone active uniquement. De plus, le champ statique appliqué à la structure ne modifiant pas fortement les énergies et les fonctions d'onde des états de sous-bande d'une période donnée, nous négligerons par la suite son effet. Nous supposons également que l'émission laser a lieu à l'énergie $\hbar\omega$ entre les états E_{n-1} et E_n et nous étudions les transitions qu'un électron appartenant au niveau supérieur de la transition laser (E_n) peut faire grâce à l'absorption du photon.

En absence de désordre, les états propres de la zone active seront notés

$$\langle \vec{\rho}, z | n\vec{k} \rangle = \chi_n(z) \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} \quad (\text{II.7})$$

avec pour énergie :

$$\varepsilon_{n\vec{k}} = E_n + \varepsilon_k \quad (\text{II.8})$$

où $(\vec{\rho}, z) = \vec{r}$, $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$. $\vec{\rho}$ est la position dans le plan des couches et \vec{k} est le vecteur d'onde bidimensionnel associé à l'état considéré. Dans ce cas idéal, une onde électromagnétique polarisée suivant la direction z , c'est-à-dire se propageant dans le plan des couches de croissance comme c'est le cas dans les structures de LCQ, ne peut induire aucune transition intra-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |n\vec{k}'\rangle$. L'invariance par translation dans le plan (x, y) impose en effet que les transitions radiatives soient verticales dans l'espace des \vec{k} par conservation du vecteur d'onde. De plus, pour cette polarisation, l'élément de matrice de couplage entre l'électron et le mode laser vaut strictement $\langle n|p_z|n\rangle = 0$ [58]. Les transitions inter-sousbande obliques $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |m\vec{k}'\rangle$, quant à elles, bien qu'associées à un élément de matrice dipolaire non nul : $\langle n|p_z|m\rangle \neq 0$, nécessitent toujours de respecter la conservation de l'énergie et du vecteur d'onde \vec{k} . Dans une structure à cascade quantique idéale, tout processus radiatif oblique est alors interdit, voir "doublement interdit" (cas des transitions intra-sousbande). Toutefois, les imperfections présentes dans une structure réelle peuvent activer ces deux types de transition. Les défauts, les impuretés et les phonons brisent l'invariance par translation dans le plan des couches, autorisant alors de tels processus obliques. Dans ce cas, la conservation simultanée de l'énergie et du vecteur d'onde peut être respectée grâce à un apport de vecteur d'onde $\Delta\vec{k}$ par le diffuseur. Ainsi, l'absorption par porteurs libres peut être traitée théoriquement comme un phénomène du second ordre impliquant d'une part le photon absorbé et d'autre part la source de diffusion. On parlera alors d'absorption assistée (ou médiée) par les défauts, les impuretés ou par émission/absorption de phonons. Remarquons que la même phénoménologie appliquée à l'émission de phonon acoustique dans le graphène a été baptisée "super-collision" [96].

Dans une structure réelle, en présence de désordre statique, un état électronique perturbé $\Psi_{n\vec{k}}$ peut être décrit en terme d'un développement au premier ordre du potentiel de désordre V_{dis} :

$$\Psi_{n\vec{k}} = |n\vec{k}\rangle + \sum_{\vec{k}''} |n\vec{k}''\rangle \frac{\langle n\vec{k}|V_{\text{dis}}|n\vec{k}''\rangle}{\varepsilon_{n\vec{k}} - \varepsilon_{n\vec{k}''}} + \sum_{n'' \neq n, \vec{k}''} |n''\vec{k}''\rangle \frac{\langle n\vec{k}|V_{\text{dis}}|n''\vec{k}''\rangle}{\varepsilon_{n\vec{k}} - \varepsilon_{n''\vec{k}''}} \quad (\text{II.9})$$

Notons par ailleurs que ce développement au premier ordre des états perturbés comporte des dénominateurs d'énergie conduisant à des divergences (voir Eq. II.9). Dans une théorie plus complète, c'est-à-dire à tous les ordres de la perturbation, celles-ci seraient supprimées et remplacées par des maxima finis. A partir de (II.9), le calcul du taux de transition devient alors très similaire à celui d'une transition oblique ($\Delta\vec{k} \neq 0$) interbande dans les matériaux massifs [97].

Pour une onde électromagnétique de fréquence angulaire ω , le taux de perte d'énergie $P(\omega)$ résultant du bilan net d'absorption (autrement dit incluant également la contribution de l'émission stimulée) en présence de diffuseurs élastiques et associé à la transition $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |m\vec{k}'\rangle$ est donné par [40] :

$$P_{nm}(\omega) = \frac{\pi e^2 E_{\text{em}}^2}{m^{*2} \omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} (f_{n\vec{k}} - f_{m\vec{k}'}) |\langle \Psi_{n\vec{k}} | p_z | \Psi_{m\vec{k}'} \rangle|^2 \delta(\varepsilon_{m\vec{k}'} - \varepsilon_{n\vec{k}} - \hbar\omega) \quad (\text{II.10})$$

où les cas $m = n$ et $m \neq n$ correspondent respectivement aux transitions obliques intra- et inter-sousbande. $\Psi_{n\vec{k}}$ et $\Psi_{m\vec{k}'}$, donnés en (II.9) désignent respectivement les fonctions d'onde de l'état initial et final perturbés par le désordre et la fonction δ traduit la conservation de l'énergie lors de l'absorption du photon. Enfin, les termes $f_{n\vec{k}}$ et $f_{m\vec{k}'}$ sont les fonctions d'occupation respectives de l'état initial et de l'état final. Le calcul de l'élément dipolaire entre les deux états perturbés conduit aux expressions :

$$\langle \Psi_{n\vec{k}} | p_z | \Psi_{n\vec{k}'} \rangle = \sum_{n'' \neq n} \left(\frac{\langle n | p_z | n'' \rangle \langle n'' \vec{k} | V_{\text{dis}} | n \vec{k}' \rangle}{E_n - E_{n''} + \hbar\omega} + \frac{\langle n \vec{k} | V_{\text{dis}} | n'' \vec{k}' \rangle \langle n'' | p_z | n \rangle}{E_n - E_{n''} - \hbar\omega} \right) \quad (\text{II.11})$$

$$\langle \Psi_{n\vec{k}} | p_z | \Psi_{m\vec{k}'} \rangle = \sum_{n''} \left(\frac{\langle n | p_z | n'' \rangle \langle n'' \vec{k} | V_{\text{dis}} | m \vec{k}' \rangle}{E_n - E_{n''} + \hbar\omega} + \frac{\langle n \vec{k} | V_{\text{dis}} | n'' \vec{k}' \rangle \langle n'' | p_z | m \rangle}{E_m - E_{n''} - \hbar\omega} \right) \quad (\text{II.12})$$

Ce développement montre qu'un couplage intermédiaire virtuel à un état de sous-bande excitée n'' est nécessaire pour avoir une absorption par porteurs libres non nulle. Ces éléments de matrice reflètent le fait qu'à l'ordre le plus bas du potentiel de désordre, le taux de diffusion de l'électron par le diffuseur élastique résulte d'une interférence de chemins quantiques pour lesquels soit le potentiel de désordre agit en premier et le couplage à la lumière suit, soit l'inverse. Les schémas de la figure II.3 représentent, d'un point de vue quantique, les transitions effectuées par un électron au cours du mécanisme d'absorption par porteurs libres assistée par une diffusion intra-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |n\vec{k}'\rangle$. Les deux contributions à l'élément de matrice y sont représentées. Les flèches verticales représentent l'interaction électron-photon (conservation du vecteur d'onde \vec{k}) et les flèches obliques vertes le couplage électron-diffuseur. Une représentation similaire est montrée sur la figure II.4 pour le mécanisme d'absorption par porteurs libres inter-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |m\vec{k}'\rangle$.

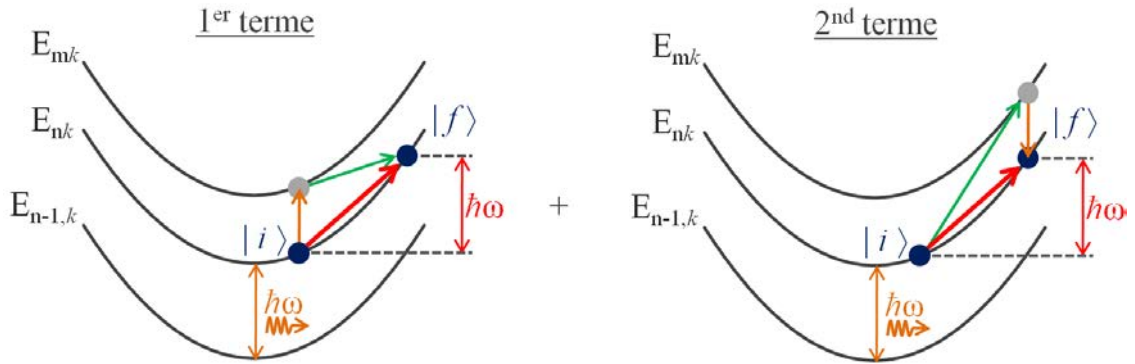


FIGURE II.3 – Représentation des transitions effectuées par l'électron au cours du mécanisme d'absorption par porteurs libres intra-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |n\vec{k}'\rangle$ médiée par un diffuseur élastique. Le photon laser est émis entre les sous-bandes E_{n-1} et E_n . Les flèches verticales oranges représentent l'interaction électron-photon. Les flèches obliques vertes représentent le couplage électron-diffuseur. Les points bleus représentent les états finaux et initiaux réels de la transition intra-sousbande oblique représentée par la flèche oblique rouge. Les points gris représentent les états virtuels intermédiaires.

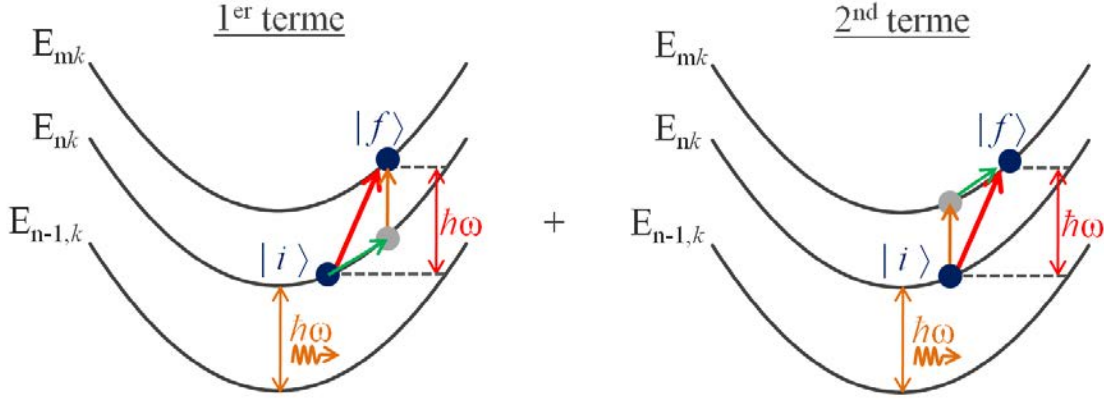


FIGURE II.4 – Représentation des transitions effectuées par l'électron au cours du mécanisme d'absorption par porteurs libres inter-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |m\vec{k}'\rangle$ médiée par un diffuseur élastique. Le photon laser est émis entre les sous-bandes E_{n-1} et E_n . Les flèches verticales oranges représentent l'interaction électron-photon. Les flèches obliques vertes représentent le couplage électron-diffuseur. Les points bleus représentent les états finaux et initiaux réels de la transition inter-sousbande oblique représentée par la flèche oblique rouge. Les points gris représentent les états virtuels intermédiaires.

Dans la suite, nous faisons une restriction à 3 sous-bandes en prenant E_{n+1} comme état virtuel intermédiaire. Nous considérons alors la situation où l'électron revient sur sa sous-bande initiale n (transition intra-sousbande) ou bien est éjecté sur la sous-bande supérieure $n + 1$ (transition inter-sousbande). Mais il est clair qu'une estimation complète de tous les processus de pertes par porteurs libres devrait nécessairement comprendre une somme sur toutes les autres sous-bandes de la structure. Dans ce cas, l'élément de matrice dipolaire devient :

$$|\langle \Psi_{n\vec{k}} | p_z | \Psi_{m\vec{k}'} \rangle|^2 = |\langle n | p_z | n+1 \rangle|^2 |\langle n\vec{k} | V_{\text{dis}} | m\vec{k}' \rangle|^2 R_{nm}^2(\omega) \quad (\text{II.13})$$

où $R_{nm}(\omega)$ est un facteur résonant dont l'expression dépend du type de la transition effectuée par l'électron :

$$R_{nm}(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{\hbar\omega - E_m - E_n} + \frac{1}{\hbar\omega + E_m - E_n} & \text{si } m = n ; \\ \frac{1}{\hbar\omega - E_m + E_n} & \text{si } m = n + 1 . \end{cases} \quad (\text{II.14})$$

Quantitativement, remplacer ω par $\omega - i\tau$ dans (II.14) aurait le même effet que de resommer la série des perturbations. Ceci implique que les formules présentées par la suite sont valables lorsque $|\omega - \omega_{nm}| \geq 1/\tau$ où ω_{nm} est la fréquence résonante inter-sousbande et τ est le temps de relaxation typique des porteurs, comme défini en section II.2.

En supposant que le mode laser est uniforme sur toutes les N_p périodes de la structure à cascade quantique, le coefficient d'absorption α est relié au taux de perte d'énergie du mode laser par [40, 98] :

$$\alpha(\omega) = \frac{N_p P(\omega)}{IV} \quad (\text{II.15})$$

où $I = \varepsilon_0 c n_r E_{\text{em}}^2 / 2$ est l'intensité de la radiation laser et $V = N_p L_z S$ est le volume de la structure entière. Le coefficient d'absorption α est alors indépendant du nombre de périodes N_p .

II.3.2 Cas des diffuseurs élastiques

Dans la suite, nous discutons les mécanismes d'absorption assistés par des diffuseurs élastiques donnant un temps de vie des porteurs de quelques picosecondes [99, 100] tels que les défauts d'interface, les impuretés ionisées et le désordre d'alliage. Cela revient alors à remplacer le potentiel V_{dis} dans les expressions (II.9) à (II.13) par celui de la source de diffusion considérée. Pour simuler la zone active, nous considérons une structure de double puits quantique 23/2/12 nm de GaAs/Al_{0.15}GaAs_{0.85}¹ ayant 6 états liés pour le mouvement en z . Chaque période est espacée de la suivante d'une barrière d'épaisseur 5.6 nm. La longueur d'une période est donc de 42.6 nm. Nous nous restreignons aux trois premiers états en considérant que le photon laser est émis à l'énergie $\hbar\omega = E_2 - E_1 = 11.41$ meV et nous étudions les transitions intra- et inter-sousbande obliques $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$ et $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |3\vec{k}'\rangle$ ($E_3 - E_2 = 11.46$ meV). Les structures de LCQ THz contenant relativement peu d'électrons, nous considérons une densité de porteurs typique de $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ [11]. Ceci nous permet alors de considérer des distributions de Maxwell-Boltzmann pour les fonction d'occupation de (II.10), pour lesquelles les deux sous-bandes sont thermalisées à la même température électronique T [77] :

$$f_{n\vec{k}} = e^{-\beta(\varepsilon_{n\vec{k}} - \mu_c)} \quad ; \quad f_{m\vec{k}'} = e^{-\beta(\varepsilon_{m\vec{k}'} - \mu_c)} \quad (\text{II.16})$$

où μ_c est le potentiel chimique du système et $\beta = (k_B T)^{-1}$. La figure II.5 montre l'évolution du coefficient d'absorption assistée par les défauts d'interface pour deux différents types de fonctions d'occupation. A ces faibles densités de porteurs, l'approche de Boltzmann reste en effet équivalente à celle de Fermi-Dirac et cela est d'autant plus vrai que la température est élevée. En revanche, pour des densités plus élevées, les distributions de Boltzmann apportent une mauvaise description des occupations et deviennent de moins en moins fiables à mesure que T diminue : le gaz d'électrons devient dégénéré (le potentiel chimique entre dans la sous-bande de conduction). Notons enfin que la dépendance linéaire du coefficient d'absorption en fonction de la densité électronique sera discutée plus en détail dans les calculs explicites qui suivent.

Rugosité d'interface

Comme décrit au chapitre I, les défauts d'interface sont modélisés par une distribution aléatoire de défauts attractifs et répulsifs gaussiens [54, 98, 101] et le potentiel V_{def} qui leur est associé est défini par l'expression (I.28). Ceux-ci sont introduits sur les deux interfaces internes de la structure de double puits quantique, maximisant ainsi leur couplage aux électrons, et chaque interface est repérée le long de l'axe de croissance par la position z_0 . Le calcul de l'élément de matrice de V_{def} inclu dans

1. Ces paramètres d'alliage correspondent à une hauteur de barrière de $V_b = 115$ meV.

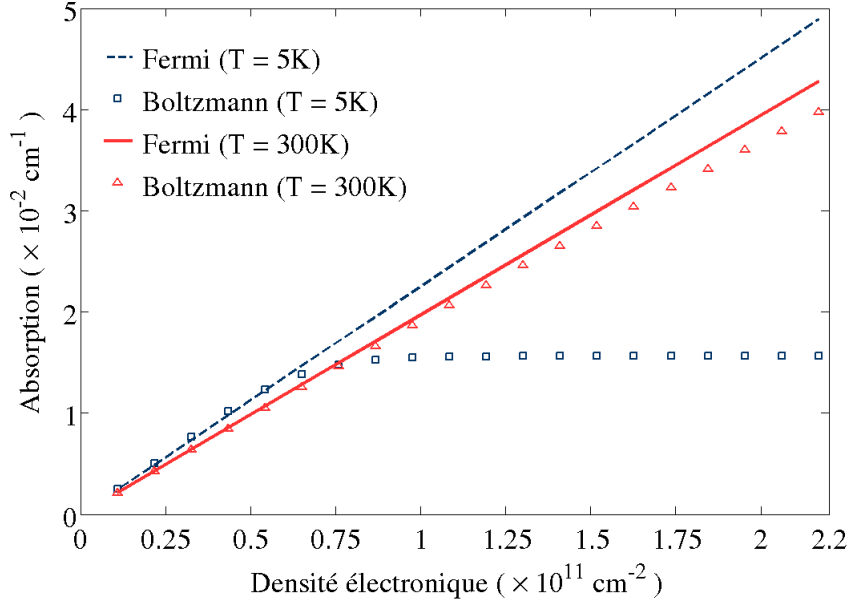


FIGURE II.5 – Evolution du coefficient d'absorption en fonction de la densité électronique pour la structure 23.8/3.1/9.8 nm de GaAs/Al_{0.15}GaAs_{0.85} en présence de désordre d'interface ($\sigma = 3.6$ nm, $f_{\text{def}} = 0.30$ et $h_{\text{def}} = 2.83$ Å). Les différentes descriptions des populations électroniques telles que l'approche de Fermi-Dirac (trait continu et trait pointillé) et celle de Maxwell-Boltzmann (carrés et triangles) sont comparées pour une température $T = 5$ K (bleu) et $T = 300$ K (rouge).

l'élément de matrice dipolaire en (II.13) conduit à l'expression suivante :

$$\langle n\vec{k} | V_{\text{def}} | m\vec{k}' \rangle = \frac{2\pi\sigma^2 V_b}{S} e^{-q^2\sigma^2/2} \sum_{z_0} [S_{nm}^{\text{rep}}(\vec{q}) u_{nm}^{\text{rep}}(z_0) - S_{nm}^{\text{att}}(\vec{q}) u_{nm}^{\text{att}}(z_0)] \quad (\text{II.17})$$

où $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ est la variation de vecteur d'onde entre l'état initial et l'état final de la diffusion élastique. Les termes S_{nm}^{att} et S_{nm}^{rep} sont respectivement des sommes sur les phases contenant les positions aléatoires $\vec{\rho}_j$ des défauts attractifs et des défauts répulsifs :

$$S_{nm}^{\text{att/rep}}(\vec{q}) = \sum_{j=1}^{N_{\text{att/rep}}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{\rho}_j} \quad (\text{II.18})$$

L'expression des intégrales u_{nm}^{att} et u_{nm}^{rep} dépend de la nature de la transition oblique. On distingue les deux cas : $m = n = 2$ pour la transition intra-sousbande et $n = 2$ et $m = 3$ pour la transition inter-sousbande :

$$u_{nm}^{\text{att}}(z_0) = \begin{cases} \int_{z_0}^{z_0+h_{\text{def}}} dz \chi_2(z) \chi_3(z) & \text{si } m = n ; \\ \int_{z_0}^{z_0+h_{\text{def}}} dz [\chi_3^2(z) - \chi_2^2(z)] & \text{si } m \neq n . \end{cases} \quad (\text{II.19})$$

$$u_{nm}^{\text{rep}}(z_0) = \begin{cases} \int_{z_0-h_{\text{def}}}^{z_0} dz \chi_2(z) \chi_3(z) & \text{si } m = n ; \\ \int_{z_0-h_{\text{def}}}^{z_0} dz [\chi_3^2(z) - \chi_2^2(z)] & \text{si } m \neq n . \end{cases} \quad (\text{II.20})$$

En considérant une distribution de défauts non corrélés, la moyenne sur les positions aléatoires des sommes (II.18) se réduit à $S_{nm}^{\text{att/rep}} = N_{\text{att/rep}}$. Le module carré de l'élément de matrice dipolaire initialement donné en (II.13) vaut alors :

$$|\langle \Psi_{n\vec{k}} | p_z | \Psi_{m\vec{k}'} \rangle|^2 = \frac{4\pi^2 \sigma^4 V_b^2}{S} e^{-q^2 \sigma^2} |\langle 2 | p_z | 3 \rangle|^2 F_{nm}^{\text{def}} R_{nm}^2(\omega) \quad (\text{II.21})$$

avec :

$$F_{nm}^{\text{def}} = \sum_{z_0} [n_{\text{att}} |u_{nm}^{\text{att}}(z_0)|^2 + n_{\text{rep}} |u_{nm}^{\text{rep}}(z_0)|^2] \quad (\text{II.22})$$

où n_{att} et n_{rep} sont les densités surfaciques de défauts attractifs et répulsifs respectivement. Le facteur F_{nm}^{def} tient compte du recouvrement des fonctions d'onde des deux états impliqués dans le couplage au défaut aux interfaces rugueuses. L'application de la conservation de l'énergie $\varepsilon_{m\vec{k}'} = \varepsilon_{n\vec{k}} + \hbar\omega$ lors du processus d'absorption par porteurs libres et le calcul des sommes sur les vecteurs d'onde \vec{k} et \vec{k}' conduisent à l'expression suivante pour le coefficient d'absorption :

$$\alpha_{nm}^{\text{def}}(\omega) = \frac{\pi e^2 n_e V_b^2 \sigma^4}{\varepsilon_0 c n_r m^* L_z \hbar^2 \omega} (1 - e^{-\beta \hbar \omega}) |\langle 2 | p_z | 3 \rangle|^2 R_{nm}(\omega)^2 I_{nm}^{\text{def}}(\omega) \quad (\text{II.23})$$

avec :

$$\begin{aligned} I_{nm}^{\text{def}}(\omega) = 2\pi F_{nm}^{\text{def}} \exp \left[-\frac{2m^* \sigma^2 (\hbar\omega - E_m + E_n)}{\hbar^2} \right] \\ \times \int_0^\infty dx e^{-x(1+\eta)} I_0 \left(\eta \sqrt{x^2 + \beta x (\hbar\omega - E_m + E_n)} \right) \\ \times \Theta[x + \beta(\hbar\omega - E_m + E_n)] \quad (\text{II.24}) \end{aligned}$$

où I_0 est la fonction de Bessel d'ordre 0 d'argument imaginaire [102], $\eta = 4m^* \sigma^2 / (\beta \hbar^2)$ et x est une variable d'intégration sans dimension. La fonction Θ désigne ici, et par la suite, la fonction de Heaviside. Comme nous l'avons évoqué dans le commentaire de la figure II.5, l'expression (II.23) prédit un coefficient d'absorption proportionnel à la densité de porteurs n_e mais aussi à la densité de diffuseurs $n_{\text{att/rep}}$ à travers le facteur F_{nm}^{def} . Cette expression ne donne par ailleurs aucun comportement en ω^{-p} comme prédit par l'approche semi-classique de Drude. Au contraire, les deux expressions relatives aux cas intra- et inter-sousbande divergent lorsque l'énergie du photon tend vers l'écart en énergie $E_3 - E_2$ à travers le facteur résonant R_{nm} . Pour la structure de double puits quantique décrite précédemment, nous avons évalué numériquement le coefficient d'absorption par porteurs libres α_{nm}^{def} en fonction de l'énergie du photon $\hbar\omega$. Nous étudions alors la dépendance de ce coefficient en fonction des différents paramètres du problème, en particulier, les paramètres de désordre.

La figure II.6 montre l'évolution du coefficient d'absorption α^{def} associé aux transitions intra- ($|2\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$) et inter-sousbande ($|2\vec{k}\rangle \rightarrow |3\vec{k}'\rangle$) obliques. Loin de la résonance, les courbes obtenues présentent des valeurs d'absorption relativement faibles, de l'ordre de 10^{-2} cm^{-1} . Celles-ci sont en accord avec les estimations antérieures de pertes par porteurs libres [92] mais sont en forte contradiction avec les estimations données par une extrapolation du modèle de Drude aux structures quasi-2D [17]. Ces faibles valeurs d'absorption résultent de plusieurs causes. Tout d'abord, le coefficient d'absorption dépend linéairement de la concentration d'électrons, or celle-ci reste petite dans les structures de LCQ THz ($\approx 10^{10} \text{ cm}^{-3}$) ; ensuite,

la nature interdite (voire doublement interdite) de ces phénomènes du second ordre réduit la probabilité de transition ; et enfin, les défauts d'interface sont des diffuseurs peu efficaces, générant un potentiel à court rayon d'action d'amplitude faible. Notons également que le coefficient d'absorption α_{22}^{def} des transitions intra-sousbande reste plus faible que α_{23}^{def} pour les transitions inter-sousbande. La principale raison à cela est que le transfert de vecteur d'onde dans le cas inter-sousbande est plus faible que dans le cas intra-sousbande, comme le montrent les arguments de l'exponentielle de I_{nm}^{def} et ceux de la fonction I_0 . Rappelons également que la transition inter-sousbande oblique est simplement interdite alors que l'intra-sousbande est doublement interdite par la conservation de l'énergie et du vecteur d'onde.

Notons par ailleurs que ces courbes présentent une augmentation du coefficient d'absorption lorsque $\omega \rightarrow 0$. Au même titre que la divergence en $\hbar\omega = E_3 - E_2$, celle-ci reflète la limite de notre approche perturbative puisque sur cette plage des basses énergies, la condition $\omega\tau \gg 1$ n'est plus vérifiée. La description du comportement du système à ces très basses fréquences (et également au voisinage de la résonance) nécessite une approche théorique plus complète, notamment en présence de diffuseurs à court temps caractéristique de diffusion tels que la rugosité d'interface.

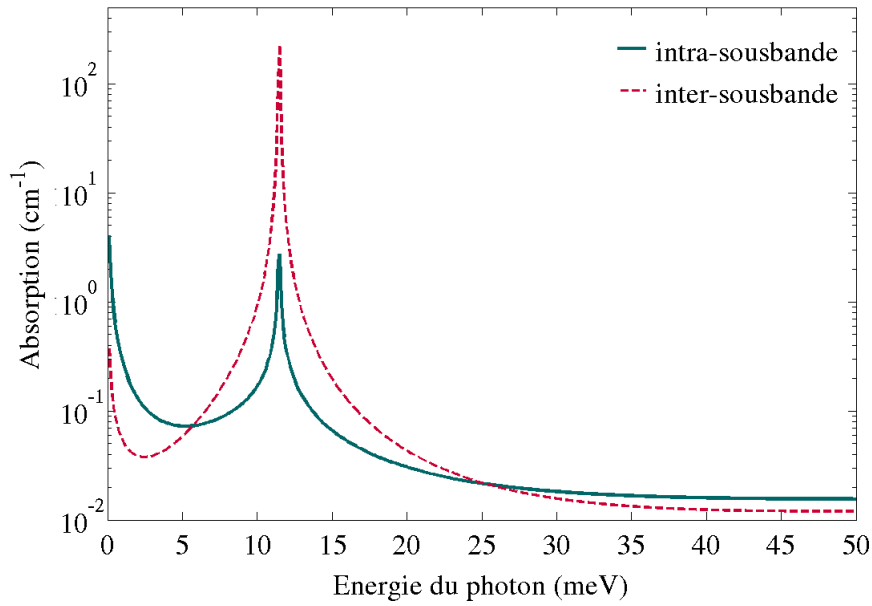


FIGURE II.6 – Coefficient d'absorption par porteurs libres médiée par les défauts d'interface (α_{def}) associé aux transitions obliques intra-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$ (continu vert) et inter-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |3\vec{k}'\rangle$ (pointillé rouge). $E_3 - E_2 = 11.46$ meV. $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $f_{\text{def}} = 0.30$, $\sigma = 3.6$ nm et $h_{\text{def}} = 2.83$ Å. $N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = N_{\text{def}}/2$. $T = 100$ K. Structure 23/2/12 nm de GaAs/Al_{0.15}GaAs_{0.85}.

La figure II.7 montre l'évolution du coefficient α^{def} pour trois fractions de recouvrement de la surface de l'échantillon par les défauts. Augmenter cette fraction f_{def} revient à augmenter le nombre de défauts à l'interface, comme indiqué dans l'expression (I.31). Comme nous l'avons évoqué précédemment, l'absorption par porteurs libres est proportionnelle à la densité défauts. A mesure que le nombre de diffuseurs augmente, la probabilité d'être assisté par l'un d'entre eux pour absorber le photon augmente et ce, linéairement. Ainsi, pour une surface d'échantillon donnée, l'absorption est proportionnelle au nombre de diffuseurs.

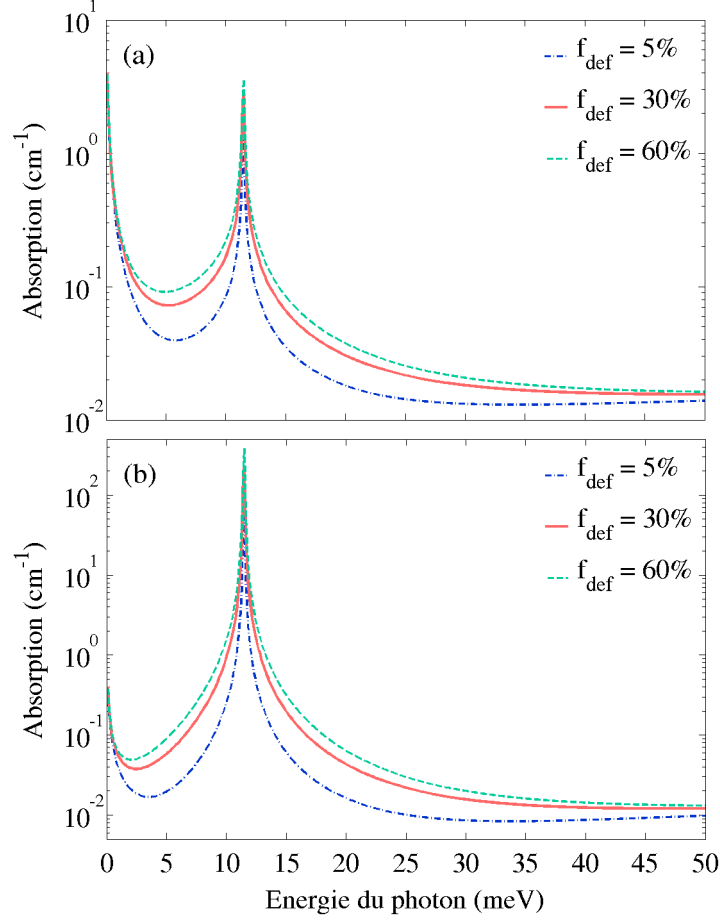


FIGURE II.7 – Coefficient d'absorption par porteurs libres médiee par les défauts d'interface (α_{def}) associé aux transitions obliques (a) intra-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$ et (b) inter-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |3\vec{k}'\rangle$ pour différentes valeurs de la fraction de recouvrement f_{def} : 0.5 (pointillé bleu), 0.30 (continu rouge) et 0.60 (pointillé vert). $E_3 - E_2 = 11.46$ meV. $n_e = 2.17 \times 10^{10}$ cm $^{-2}$. $\sigma = 3.6$ nm et $h_{\text{def}} = 2.83$ Å. $N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = N_{\text{def}}/2$. $T = 100$ K. Structure 23/2/12 nm de GaAs/Al $_{0.15}$ GaAs $_{0.85}$.

Une autre dépendance moins intuitive mais tout aussi importante est celle qui concerne l'extension spatiale des défauts, désignée par le paramètre σ dans notre modèle de désordre [54] (voir sous-section I.5.3). La figure II.8 montre l'évolution du coefficient α^{def} en fonction de l'énergie $\hbar\omega$ pour deux valeurs de ce paramètre σ . D'une part, bien qu'une augmentation de σ entraîne une diminution du nombre de défauts à fraction f_{def} et surface S fixées, l'absorption augmente avec σ et d'autre part, les pentes des ailes d'absorption sont fortement modifiées par une augmentation de ce paramètre. Dès lors que ce dernier apparaît à plusieurs reprises dans les préfacteurs et les exposants des équations (II.23) et (II.24), la dépendance $\alpha^{\text{def}}(\sigma)$ à une énergie de photon fixée reste complexe. Il est néanmoins possible d'avoir un raisonnement qualitatif reposant sur l'idée que plus la surface efficace de diffusion est grande, plus la diffusion est probable augmentant ainsi les pertes par porteurs libres.

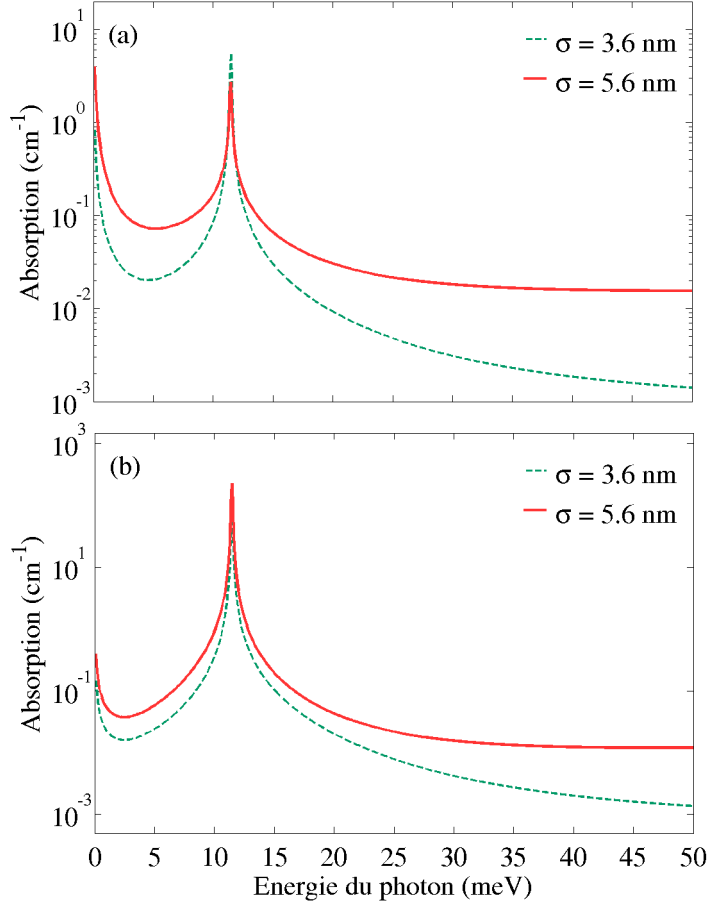


FIGURE II.8 – Coefficient d'absorption par porteurs libres médiée par les défauts d'interface (α_{def}) associé aux transitions obliques (a) intra-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$ et (b) inter-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |3\vec{k}'\rangle$ pour différentes extensions spatiales de défaut : $\sigma = 3.6$ nm (pointillé vert) et $\sigma = 5.6$ nm (continu rouge). $E_3 - E_2 = 11.46$ meV. $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $f_{\text{def}} = 0.30$ et $h_{\text{def}} = 2.83 \text{ \AA}$. $N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = N_{\text{def}}/2$. $T = 100$ K. Structure 23/2/12 nm de GaAs/Al_{0.15}GaAs_{0.85}.

Impuretés ionisées

Les impuretés ionisées sont décrites par le potentiel Coulombien défini par l'expression (I.14) et sont réparties sur un plan (x, y) repéré par la position z_l sur l'axe de croissance. La figure II.9 représente le profil de bande de conduction ainsi que le module carré des fonctions d'onde enveloppe χ_2 et χ_3 de la structure de double puits considérée. Les trois plans d'impuretés pris en compte dans le calcul qui suit y sont repérés par les positions z_l ($l = 1, 2, 3$). L'abscisse $z_1 = 5$ nm correspond à une position où l'amplitude de χ_3 est plus importante que celle de χ_2 , l'abscisse $z_2 = 31$ nm coïncide avec le maximum de la fonction χ_2^2 et enfin $z_3 = -8$ nm repère une position dans la barrière injectrice de la structure. Au cours de cette étude, nous nous intéressons uniquement aux impuretés donneuses induites par le dopage de la structure. Celles-ci sont alors décrites par un potentiel coulombien purement attractif. Une concentration de porteurs de $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ correspond à un nombre d'impuretés par plan de $N_{\text{imp}} = 8$.

En suivant la même démarche de calcul que celle établie pour les défauts d'in-

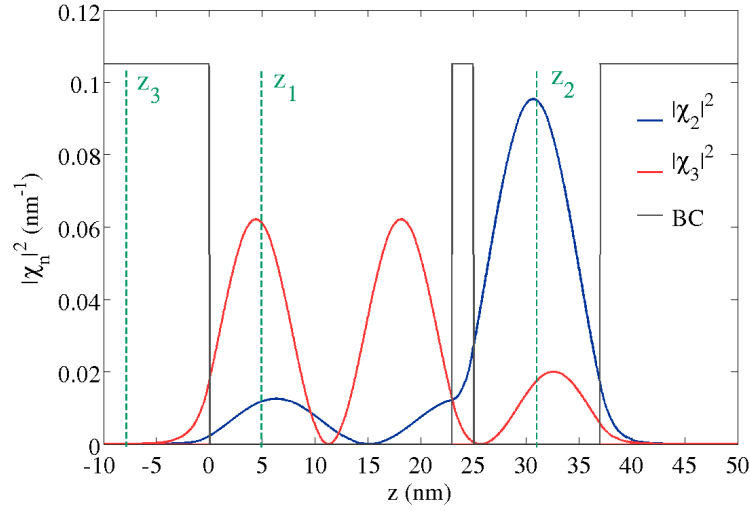


FIGURE II.9 – Profil de la bande de conduction (trait continu gris) et modules carrés des fonctions d'onde enveloppe χ_2 (trait continu bleu) et χ_3 (trait continu rouge) de la structure de double puits quantique 23/2/12 nm de GaAs/Al_{0.15}GaAs_{0.85}. Les plans d'impuretés ionisées, repérés par la position z_l ($l = 1, 2, 3$), sont représentés par les lignes verticales vertes.

terface, nous trouvons l'expression de l'élément de matrice de désordre suivant :

$$\langle n\vec{k} | V_{\text{imp}} | m\vec{k}' \rangle = \frac{-2\pi e^2}{\kappa q S} S^{\text{imp}}(\vec{q}) F_{nm}^{\text{imp}}(q, z_l) \quad (\text{II.25})$$

où $\kappa = 4\pi\epsilon_0\epsilon_r$ et $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$. Le terme $S^{\text{imp}}(\vec{q})$ est une somme similaire aux termes $S_{nm}^{\text{att/rep}}$ comprenant les positions aléatoires des impuretés :

$$S^{\text{imp}}(\vec{q}) = \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{\rho}_j} \quad (\text{II.26})$$

et F_{nm}^{imp} est le facteur de forme associé au potentiel coulombien dont l'expression dépend également de la nature des transitions :

$$F_{nm}^{\text{imp}}(q, z_l) = \begin{cases} \int dz \chi_2(z) \chi_3(z) e^{-q|z-z_l|} & \text{si } m = n ; \\ \int dz [\chi_3^2(z) - \chi_2^2(z)] e^{-q|z-z_l|} & \text{si } m \neq n . \end{cases} \quad (\text{II.27})$$

Notons que ces deux fonctions dépendent de la localisation (ou délocalisation) et du recouvrement des fonctions d'onde dans la structure, en particulier à la position z_l du plan de dopage. Le calcul du coefficient d'absorption donne alors :

$$\alpha_{nm}^{\text{imp}}(\omega) = \frac{e^6 n_e n_{\text{imp}}}{16\pi\epsilon_0^3 \epsilon_r^2 c n_r m^* L_z \hbar^2 \omega} (1 - e^{-\beta \hbar \omega}) |\langle 2 | p_z | 3 \rangle|^2 R_{nm}^2(\omega) I_{nm}^{\text{imp}}(\omega) \quad (\text{II.28})$$

où les facteurs résonants R_{nm} ont déjà été définis en (II.14) à la section précédente et où :

$$I_{nm}^{\text{imp}}(\omega) = \sum_{z_l} \int_0^\infty dx e^{-x} \Theta[x + \beta(\hbar\omega - E_m + E_n)] \times \int_0^{2\pi} d\theta \frac{F_{nm}^{\text{imp}}[Q_{nm}(x, \theta, \omega); z_l]}{Q_{nm}^2(x, \theta, \omega)} \quad (\text{II.29})$$

avec Q_{nm} le module de la variation de vecteur d'onde :

$$Q_{nm}^2(x, \theta, \omega) = \frac{2m^*}{\hbar^2\beta} \times \left[2x + \beta(\hbar\omega - E_m + E_n) - 2\cos\theta\sqrt{x^2 + \beta x(\hbar\omega - E_m + E_n)} \right] \quad (\text{II.30})$$

Le coefficient d'absorption α_{nm}^{imp} est, sur plusieurs aspects, similaire à α_{nm}^{def} obtenu pour les défauts d'interface : la dépendance en fonction de la concentration électronique n_e et de la densité surfacique des impuretés n_{imp} sont linéaires. Notons que dans ce calcul, nous avons considéré un potentiel de Coulomb non-écranté. Cette approximation est d'autant plus fiable à haute température puisque la longueur d'écrantage de Debye $q_D^{-1} = n_e e^2 / [k_B T \varepsilon_r \varepsilon_0]$ vaut 80 nm à $T = 300$ K. Par ailleurs, les transitions virtuelles obliques sont caractérisées par les éléments de matrice $\langle 2\vec{k} | V_{\text{imp}} | 3\vec{k}' \rangle$ ou $\langle 3\vec{k} | V_{\text{imp}} | 2\vec{k}' \rangle$. L'écrantage du potentiel coulombien peut alors être négligé si la variation de vecteur d'onde $Q_{nm} \gg q_D$ puisque à grand transfert de vecteur d'onde, les potentiels écrantés et non-écrantés coïncident. Mais nous savons que pour le cas d'une transition intra-sousbande par exemple, la conservation de l'énergie impose que $k' = \sqrt{k^2 + 2m^*\omega/\hbar}$. Du coup, l'écrantage peut être négligé si $k' - k = \sqrt{k^2 + 2m^*\omega/\hbar} - k \gg q_D$. Notons qu'ici $\sqrt{2m^*\omega/\hbar} \approx 10^8 \text{ cm}^{-1}$ ce qui est typiquement 10 fois plus grand que q_D . Pour les états électroniques les plus peuplés, $Q_{nm} \gg q_D$ et les effets d'écrantage peuvent donc être négligés. Au chapitre III, ces effets d'écrantage seront néanmoins pris en compte à l'approximation de Debye-Hückel dans notre calcul de diagonalisation numérique du Hamiltonien en présence de désordre car nous nous intéressons à un aspect différent des effets du désordre tels que la création d'états liés ou résonants. De plus, et plus généralement, ces effets se produisent au-delà de l'approximation de Born.

La figure II.10 présente les résultats du calcul du coefficient d'absorption α_{nm}^{imp} donné en (II.28) pour les différentes positions du plan de dopage de la figure II.9 et pour les transitions obliques intra-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$ (graphe a) et inter-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |3\vec{k}'\rangle$ (graphe b). L'allure obtenue est similaire à celle du coefficient α^{def} : les facteurs résonants R_{nm} introduisent de nouveau la résonance en $\hbar\omega = E_3 - E_2$ et les transitions intra-sousbande donnent une absorption d'un ordre de grandeur plus faible que les transitions inter-sousbande. En revanche, contrairement au désordre d'interface, le régime $\omega\tau < 1$ n'est pas atteint pour les donneurs lorsque $\omega \rightarrow 0$.

Comme nous l'avons montré au chapitre I, la force du potentiel coulombien dépend de la position relative des impuretés par rapport à la densité de présence électronique. Placer les impuretés au maximum (ou minimum) du produit des fonctions d'onde des états initiaux et finaux entraîne une absorption plus (moins) importante. La présence d'un plan d'impuretés dans la barrière injectrice ($z_l = -8 \text{ nm}$) conduit

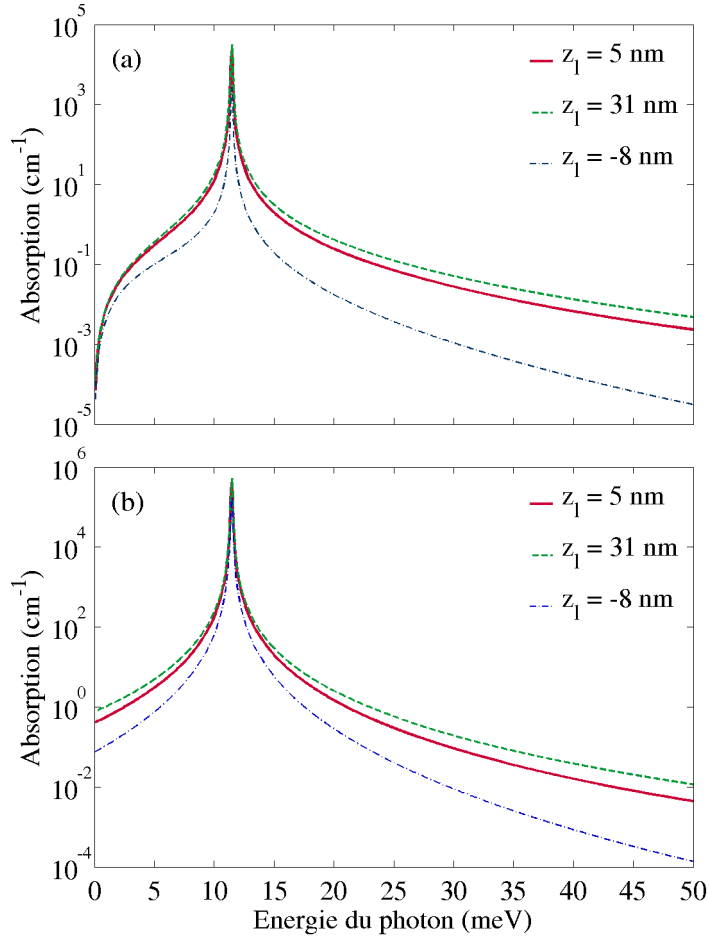


FIGURE II.10 – Coefficient d’absorption par porteurs libres médiee par les impuretés ionisées (α_{imp}) associé aux transitions obliques (a) intra-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$ et (b) inter-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |3\vec{k}'\rangle$ pour différentes positions du plan d’impuretés : $z_l = 5$ nm (continu rouge), $z_l = 31$ nm (pointillé vert) et $z_l = -8$ nm (pointillé bleu). $E_3 - E_2 = 11.46$ meV. $n_{\text{imp}} = n_e = 2.17 \times 10^{10}$ cm⁻². $T = 100$ K. Structure 23/2/12 nm de GaAs/Al_{0.15}GaAs_{0.85}.

à une absorption significativement peu efficace puisque les fonctions d’onde y ont une amplitude très faible. La position $z_l = 31$ nm est celle qui donne le coefficient d’absorption le plus important car l’écart entre les amplitudes des fonctions d’onde y est plus grand qu’en $z_l = 5$ nm, augmentant ainsi les termes F_{nm}^{imp} . Au chapitre III, nous analyserons en détail, par diagonalisation numérique, l’influence de la position des donneurs dans la structure sur la forme et la largeur de la raie d’absorption [103]. De nouveau, nous constaterons que la suppression des divergences dans les facteurs résonants implique de ne pas se limiter à l’ordre le plus bas au potentiel de désordre.

Désordre d’alliage

Le désordre d’alliage est traité à l’approximation de cristal virtuel (VCA) [58, 67] décrite au chapitre I. Nous considérons donc des diffuseurs “delta” localisés sur chaque site du réseau cristallin. A partir de l’élément de matrice de désordre calculé en (I.20), l’élément de matrice dipolaire entre les deux états perturbés de la transition

vaut :

$$|\langle \Psi_{n\vec{k}} | p_z | \Psi_{m\vec{k}'} \rangle|^2 = \frac{|\langle 2 | p_z | 3 \rangle|^2}{(\varepsilon_m - \varepsilon_n - \hbar\omega)^2} \frac{x_{\text{alloy}}(1 - x_{\text{alloy}})\Delta V^2 \Omega_0}{S} F_{nm}^{\text{alloy}} \quad (\text{II.31})$$

où x_{alloy} est le pourcentage d'alliage du matériau, ΔV est le potentiel effectif de désordre et Ω_0 est le volume de la cellule unitaire du cristal. De même ici nous retrouvons les termes de localisation/délocalisation des fonctions d'onde à travers les facteurs suivants :

$$F_{nm}^{\text{alloy}} = \begin{cases} \int_{\text{alloy}} dz \chi_2(z) \chi_3(z) & \text{si } m = n ; \\ \int_{\text{alloy}} dz [\chi_3^2(z) - \chi_2^2(z)] & \text{si } m \neq n . \end{cases} \quad (\text{II.32})$$

Ces deux facteurs sont intégrés sur tout l'axe z en supposant que le désordre d'alliage est présent sur toute la structure contrairement aux défauts d'interface ou encore aux impuretés ionisées qui sont localisés sur des plans précis.

A partir de l'élément de matrice (II.31), l'expression suivante du coefficient d'absorption est établie en présence de désordre d'alliage :

$$\alpha_{nm}^{\text{alloy}}(\omega) = \frac{e^2 x_{\text{alloy}}(1 - x_{\text{alloy}})\Delta V^2 \Omega_0}{\pi m^* \varepsilon_0 c n_r L_z \hbar^2 \omega} (1 - e^{-\beta \hbar \omega}) |\langle 2 | p_z | 3 \rangle|^2 R_{nm}^2(\omega) I_{nm}^{\text{alloy}}(\omega) \quad (\text{II.33})$$

avec :

$$I_{nm}^{\text{alloy}}(\omega) = \int d^2 k e^{-\beta \hbar^2 k^2 / 2m^*} |F_{nm}^{\text{alloy}}|^2 \Theta \left(\hbar\omega - E_m + E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right) \quad (\text{II.34})$$

La figure II.11 montre les résultats du calcul de $\alpha_{nm}^{\text{alloy}}$ pour la structure 23/2/12 nm d' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.43}\text{As}/\text{GaAs}_{0.51}\text{Sb}_{0.49}$. Les paramètres de désordre sont les suivants : $\Delta V = 0.6$ eV [69], $x_{\text{alloy}} = 0.53$ dans les puits de la structure et $x_{\text{alloy}} = 0.51$ dans les barrières. $\Omega_0 = a_0^3/4$ où $a_0 = 5.935$ Å [104]. La température est fixée à $T = 100$ K et trois calculs différents sont comparés : cas d'un désordre dans les barrières uniquement, dans les puits uniquement et enfin sur toute la structure de double puits. Compte tenu de la très faible localisation des fonctions d'onde dans les barrières, l'essentielle de la contribution aux pertes est apportée par le désordre présent dans les puits d' InGaAs . Ainsi, les intégrales en z des facteurs F_{nm}^{alloy} en (II.32) peuvent alors être restreintes aux puits uniquement et une seule fraction d'alliage, $x_{\text{alloy}} = 0.53$, peut alors être prise en compte. Une allure similaire aux précédents mécanismes de diffusion est de nouveau obtenue : la résonance est située à l'énergie $E_3 - E_2$ (ici 15.15 meV pour cette structure ternaire), les valeurs du coefficient d'absorption loin de la résonance restent du même ordre de grandeur que les précédentes estimations relatives aux défauts d'interface et aux impuretés ionisées, mais restent toujours en fort contraste avec celles prédites par l'extrapolation du modèle semi-classique de Drude aux structures quasi-2D.

II.3.3 Cas des diffuseurs inélastiques

Jusqu'à présent, nous avons traité en détail le cas d'une absorption par porteurs libres médiée par les diffuseurs élastiques présents dans la structure. Or, il est bien

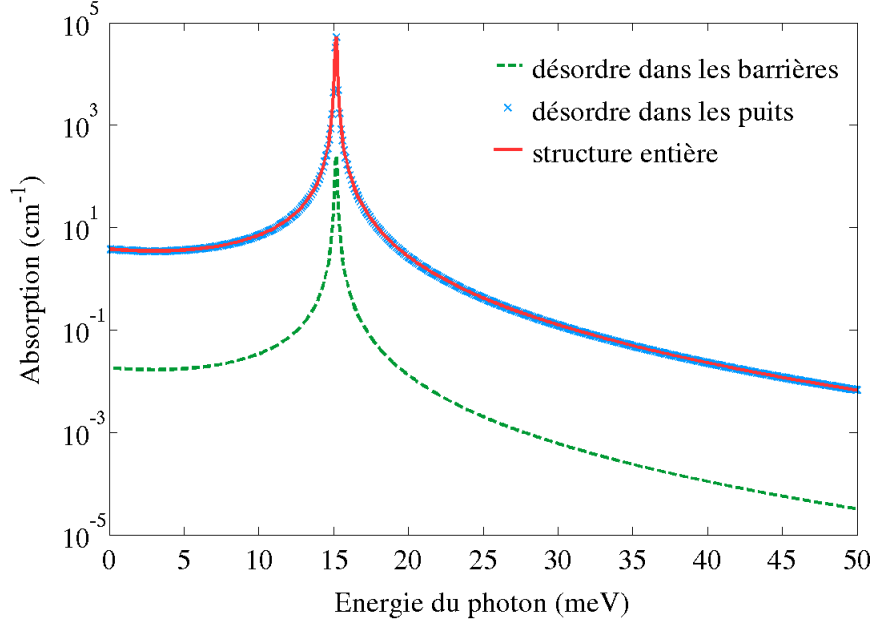


FIGURE II.11 – Coefficient d’absorption par porteurs libres médiée par le désordre d’alliage (α_{alloy}) associé aux transitions obliques intra-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$ pour une localisation du désordre d’alliage dans les barrières (pointillé vert), les puits quantiques (croix bleues) ou dans la structure entière 23/2/12 nm d’ $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.43}\text{As}/\text{GaAs}_{0.51}\text{Sb}_{0.49}$ (continu rouge). $E_3 - E_2 = 11.46$ meV. $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $\Delta V = 0.6$ eV et $x_{\text{alloy}} = 0.53$ dans InGaAs et $x_{\text{alloy}} = 0.51$ dans GaAsSb. $T = 100$ K.

connu et bien établi que les interactions électron-phonon, notamment phonon LO, dominent la mobilité électronique des semiconducteurs III-V et II-VI à haute température [77, 100]. Il paraît donc évident que ces couplages inélastiques affectent également l’absorption par porteurs libres dans les hétérostructures de type LCQ. Dans ce paragraphe, nous détaillons les processus de pertes par porteurs libres assistés par l’émission et l’absorption de phonon. Nous traitons deux types de phonons présents dans ces structures : les phonons LO dans un premier temps et dans un second temps, les phonons LA.

Phonons optiques longitudinaux

En présence de ces diffuseurs inélastiques, nous devons désormais considérer des états électroniques couplés à un réservoir de bosons contenant N_q phonons. Ainsi, par analogie au cas des diffuseurs élastiques, nous étudions les transitions obliques du type $|\Psi_{n\vec{k}, N_q}\rangle \rightarrow |\Psi_{m\vec{k}', N_q-1}\rangle$ pour une absorption de phonon et $|\Psi_{n\vec{k}, N_q}\rangle \rightarrow |\Psi_{m\vec{k}', N_q+1}\rangle$ pour une émission de phonon. Ces deux processus sont représentés sur la figure II.12 pour l’absorption de phonon LO et sur la figure II.13 pour l’émission. Les flèches oranges dirigées verticalement représentent l’absorption du photon laser d’énergie $\hbar\omega$ et les flèches obliques vertes l’absorption/émission du phonon LO. Notons qu’ici, en plus d’apporter une variation de vecteur d’onde à l’électron, le couplage au phonon modifie également le bilan énergétique du porteur. Par une absorption de phonon LO, l’électron atteint un état d’énergie $\hbar\omega + \hbar\omega_{\text{LO}}$, tandis que par une émission de phonon LO, les états d’énergie $\hbar\omega - \hbar\omega_{\text{LO}}$ sont accessibles.

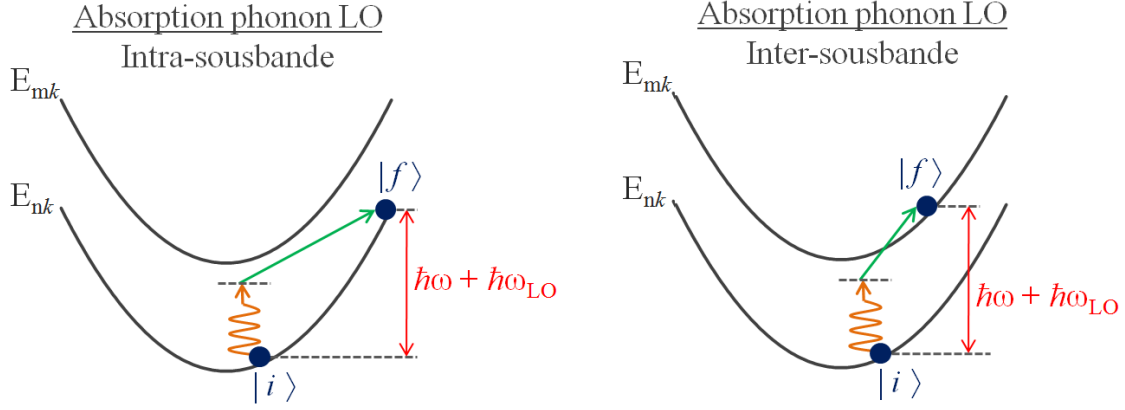


FIGURE II.12 – Représentation des transitions effectuées par l'électron au cours du mécanisme d'absorption par porteurs libres intra-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |m\vec{k}'\rangle$ (schéma de droite) et inter-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |m\vec{k}'\rangle$ (schéma de gauche) assisté par l'absorption d'un phonon LO. Le photon laser d'énergie $\hbar\omega$ est absorbé par un électron. Les flèches oranges représentent l'interaction électron-photon. Les flèches obliques vertes représentent le couplage électron-phonon LO. Les points bleus représentent les états finaux et initiaux réels de la transition oblique considérée. Les segments en pointillé gris représentent les niveaux d'énergie virtuels intermédiaires. La conservation de l'énergie impose $E_{m\vec{k}'} - E_{n\vec{k}} = \hbar\omega + \hbar\omega_{\text{LO}}$.

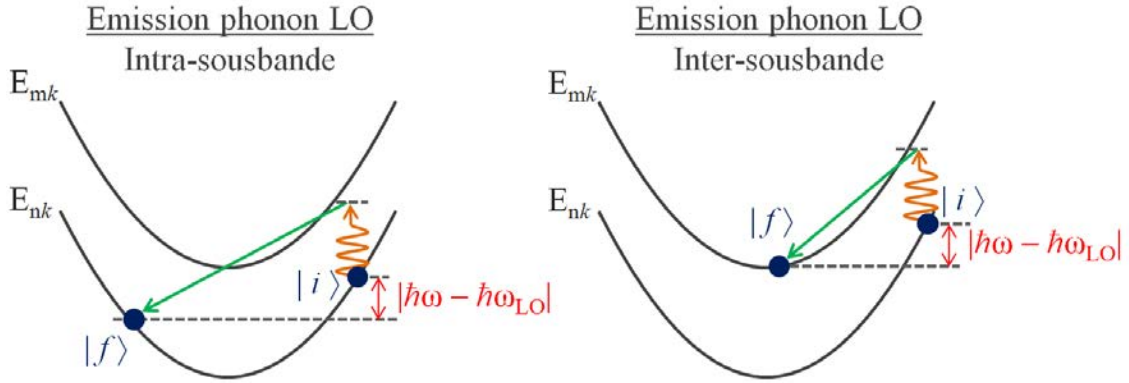


FIGURE II.13 – Représentation des transitions effectuées par l'électron au cours du mécanisme d'absorption par porteurs libres intra-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |m\vec{k}'\rangle$ (schéma de droite) et inter-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |m\vec{k}'\rangle$ (schéma de gauche) assisté par l'émission d'un phonon LO. Le photon laser d'énergie $\hbar\omega$ est absorbé par un électron. Les flèches oranges représentent l'interaction électron-photon. Les flèches obliques vertes représentent le couplage électron-phonon LO. Les points bleus représentent les états finaux et initiaux réels de la transition oblique considérée. Les segments en pointillé gris représentent les niveaux d'énergie virtuels intermédiaires. La conservation de l'énergie impose $E_{m\vec{k}'} - E_{n\vec{k}} = \hbar\omega - \hbar\omega_{\text{LO}}$.

Les états impliqués dans les transitions obliques ont pour expression :

$$|i\rangle = |n, \vec{k}\rangle \Pi_{\vec{q}} \otimes |N_q, \vec{q}\rangle \quad (\text{II.35})$$

$$|f\rangle = |m, \vec{k}'\rangle \Pi_{\vec{q}} \otimes |N_q \pm 1, \vec{q}\rangle \quad (\text{II.36})$$

Par un calcul analogue à celui de l'expression (II.10), nous obtenons le taux de perte

d'énergie pour un processus d'absorption assisté par l'absorption d'un phonon LO :

$$P_{nm}^{\text{LOabs}}(\omega) = \frac{\pi e^2 E_{\text{em}}^2}{m^{*2} \omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{\vec{q}} \left[f_{n\vec{k}}(1 - f_{m\vec{k}'}) |\langle \Psi_{n\vec{k}, N_q} | p_z | \Psi_{m\vec{k}', N_q-1} \rangle|^2 \right. \\ \left. - f_{m\vec{k}'}(1 - f_{n\vec{k}}) |\langle \Psi_{m\vec{k}', N_q-1} | p_z | \Psi_{n\vec{k}, N_q} \rangle|^2 \right] \delta(\varepsilon_{m\vec{k}'} - \varepsilon_{n\vec{k}} - \hbar\omega - \hbar\omega_{\text{LO}}) \quad (\text{II.37})$$

et de même pour un processus assisté par l'émission de phonon LO :

$$P_{nm}^{\text{LOemi}}(\omega) = \frac{\pi e^2 E_{\text{em}}^2}{m^{*2} \omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{\vec{q}} \left[f_{n\vec{k}}(1 - f_{m\vec{k}'}) |\langle \Psi_{n\vec{k}, N_q} | p_z | \Psi_{m\vec{k}', N_q+1} \rangle|^2 \right. \\ \left. - f_{m\vec{k}'}(1 - f_{n\vec{k}}) |\langle \Psi_{m\vec{k}', N_q+1} | p_z | \Psi_{n\vec{k}, N_q} \rangle|^2 \right] \delta(\varepsilon_{m\vec{k}'} - \varepsilon_{n\vec{k}} - \hbar\omega + \hbar\omega_{\text{LO}}) \quad (\text{II.38})$$

où \vec{q} est le vecteur tridimensionnel du phonon LO.

A partir de la conversion établie en (II.15), le coefficient d'absorption relatif à ces différentes diffusions inélastiques peut être évalué. Pour une absorption de phonon LO, celui-ci vaut alors :

$$\alpha_{nm}^{\text{LOabs}}(\omega) = \frac{e^4 n_e \omega_{\text{LO}} N_q}{16\pi \varepsilon_0^2 \varepsilon_p c n_r m^* L_z} \frac{|\langle 2 | p_z | 3 \rangle|^2}{\hbar \omega} R_{nm}^2(\omega) \left[(1 - e^{-\beta \hbar \omega} e^{(\beta_L - \beta) \hbar \omega_{\text{LO}}}) I_{nm, K}^{\text{LOabs}}(\omega) \right. \\ \left. + \frac{n_e \hbar^2 \pi}{2m^* k_B T} (e^{-\beta \hbar \omega} e^{(\beta_L - \beta) \hbar \omega_{\text{LO}}} - e^{-\beta(\hbar \omega + \hbar \omega_{\text{LO}})}) I_{nm, \Xi}^{\text{LOabs}}(\omega) \right] \quad (\text{II.39})$$

où $\varepsilon_p = \left(\frac{1}{\varepsilon_r(\infty)} - \frac{1}{\varepsilon_r} \right)$ et où N_q est la fonction d'occupation de Bose pour les phonons :

$$N_q = \frac{1}{e^{\beta_L \hbar \omega_{\text{LO}}} - 1} \quad (\text{II.40})$$

avec $\beta_L = (k_B T_L)^{-1}$ où T_L est la température du réseau. Le facteur résonant R_{nm} de l'expression (II.14) est le même que celui précédemment établi pour les diffuseurs élastiques. Les fonctions $I_{nm, Q}^{\text{LOabs}}(\omega)$ où $Q = K$ ou Ξ sont définies par :

$$I_{nm, Q}^{\text{LOabs}}(\omega) = \int_0^\infty dx e^{-x} \Theta[x + \beta(\hbar\omega + \hbar\omega_{\text{LO}} - E_m + E_n)] \\ \times \int_0^{2\pi} d\theta \frac{F_{nm}^{\text{LO}}[Q_{nm}(x, \theta, \omega)]}{Q_{nm}(x, \theta, \omega)} \quad (\text{II.41})$$

comprenant les facteurs de forme suivants :

$$F_{22}^{\text{LO}}(Q_{22}) = \int dz \int dz' \chi_3(z) \chi_3(z') \chi_2(z) \chi_2(z') e^{-Q_{22}|z-z'|} \quad (\text{II.42})$$

$$F_{23}^{\text{LO}}(Q_{23}) = \int dz \int dz' [\chi_3^2(z) \chi_3^2(z') + \chi_2^2(z) \chi_2^2(z') - 2\chi_3^2(z) \chi_2^2(z')] e^{-Q_{23}|z-z'|} \quad (\text{II.43})$$

De nouveau, comme c'était le cas des potentiels de diffusion élastique, ces deux facteurs de forme F_{nm}^{LO} contiennent les termes de la localisation ou délocalisation des fonctions d'onde dans la structure. Ceux-ci dépendent également de la valeur de la

variation de vecteur d'onde $Q_{nm} = K_{nm}$ ou Ξ_{nm} comme suit (pour un processus d'absorption de phonon LO uniquement) :

$$K_{nm}^2(x, \theta, \omega) = \frac{2m^*}{\hbar^2\beta} [2x + \beta(\hbar\omega + \hbar\omega_{LO} - E_m + E_n) - 2\cos\theta\sqrt{x^2 + \beta x(\hbar\omega + \hbar\omega_{LO} - E_m + E_n)}] \quad (\text{II.44})$$

$$\Xi_{nm}^2(x, \theta, \omega) = \frac{m^*}{\hbar^2\beta} [2x + 2\beta(\hbar\omega + \hbar\omega_{LO} - E_m + E_n) - 2\cos\theta\sqrt{x^2 + 2\beta x(\hbar\omega + \hbar\omega_{LO} - E_m + E_n)}] \quad (\text{II.45})$$

Le coefficient d'absorption dans le cas d'une émission de phonon LO est quant à lui donné par :

$$\alpha_{nm}^{\text{LOemi}}(\omega) = \frac{e^4 n_e \omega_{LO} (N_q + 1) |\langle 2|p_z|3 \rangle|^2}{16\pi\epsilon_0^2 \epsilon_p c n_r m^* L_z} \frac{R_{nm}^2(\omega)}{\hbar\omega} \left[(1 - e^{-\beta\hbar\omega} e^{(\beta-\beta_L)\hbar\omega_{LO}}) I_{nm,K}^{\text{LOemi}}(\omega) + \frac{n_e \hbar^2 \pi}{2m^* k_B T} (e^{-\beta\hbar\omega} e^{(\beta-\beta_L)\hbar\omega_{LO}} - e^{-\beta(\hbar\omega - \hbar\omega_{LO})}) I_{nm,\Xi}^{\text{LOemi}}(\omega) \right] \quad (\text{II.46})$$

pour lequel les fonctions $I_{nm,Q}^{\text{LOemi}}$ ($Q = K$ ou Ξ) valent :

$$I_{nm,Q}^{\text{LOemi}} = \int_0^\infty dx e^{-x} \Theta[x + \beta(\hbar\omega - \hbar\omega_{LO} - E_m + E_n)] \times \int_0^{2\pi} d\theta \frac{F_{nm}^{\text{LO}}[Q_{nm}(x, \theta, \omega)]}{Q_{nm}(x, \theta, \omega)} \quad (\text{II.47})$$

Nous retrouvons les mêmes facteurs de forme F_{nm}^{LO} donnés en (II.43) mais, cette fois-ci, ceux-ci dépendent des vecteurs d'onde suivants :

$$K_{nm}^2(x, \theta, \omega) = \frac{2m^*}{\hbar^2\beta} [2x + \beta(\hbar\omega - \hbar\omega_{LO} - E_m + E_n) - 2\cos\theta\sqrt{x^2 + \beta x(\hbar\omega - \hbar\omega_{LO} - E_m + E_n)}] \quad (\text{II.48})$$

$$\Xi_{nm}^2(x, \theta, \omega) = \frac{m^*}{\hbar^2\beta} [2x + 2\beta(\hbar\omega - \hbar\omega_{LO} - E_m + E_n) - 2\cos\theta\sqrt{x^2 + 2\beta x(\hbar\omega - \hbar\omega_{LO} - E_m + E_n)}] \quad (\text{II.49})$$

Notons que le second terme des expressions (II.39) et (II.46) donne, comme attendu pour une faible concentration de porteurs et pour une distribution de Boltzmann, une contribution négligeable comparée au premier terme car celui-ci possède une dépendance quadratique en la fonction d'occupation, tandis que le premier a une dépendance linéaire. Dans des structures contenant davantage de porteurs, des distributions de Fermi-Dirac pour les porteurs thermalisés devraient être prises en compte et dans ce cas, le blocage de Pauli pourrait jouer un rôle important comme l'atteste encore une fois la figure II.5.

Les courbes de la figure II.14 présentent les résultats des calculs de $\alpha_{nm}^{\text{LOabs}}$ et $\alpha_{nm}^{\text{LOemi}}$ pour les transitions intra- en inter-sousbande décrites sur les figures II.12 et II.13. Les graphes (a) et (b) représentent l'évolution de $\alpha_{nm}^{\text{LOabs}}$ en fonction de $\hbar\omega$ et les graphes (c) et (d) celle de $\alpha_{nm}^{\text{LOemi}}$. Deux températures T_L de réseau sont considérées : $T_L = 100$ K et 300 K, et pour ce premier calcul, une température électronique égale à celle du réseau est prise en compte ($T = T_L$). Ces coefficients d'absorption sont tous deux proportionnels au facteur d'occupation des phonons N_q , or ce dernier étant contrôlé par la température T_L , l'amplitude des pertes par porteurs libres présente une forte dépendance thermique. Le nombre de phonons augmentant avec la température, l'absorption par porteurs libres aussi. A faible valeur de T_L , l'absorption/émission de LO phonon reste peu efficace. Puis, à mesure que T_L augmente, les phonons LO deviennent les diffuseurs dominants.

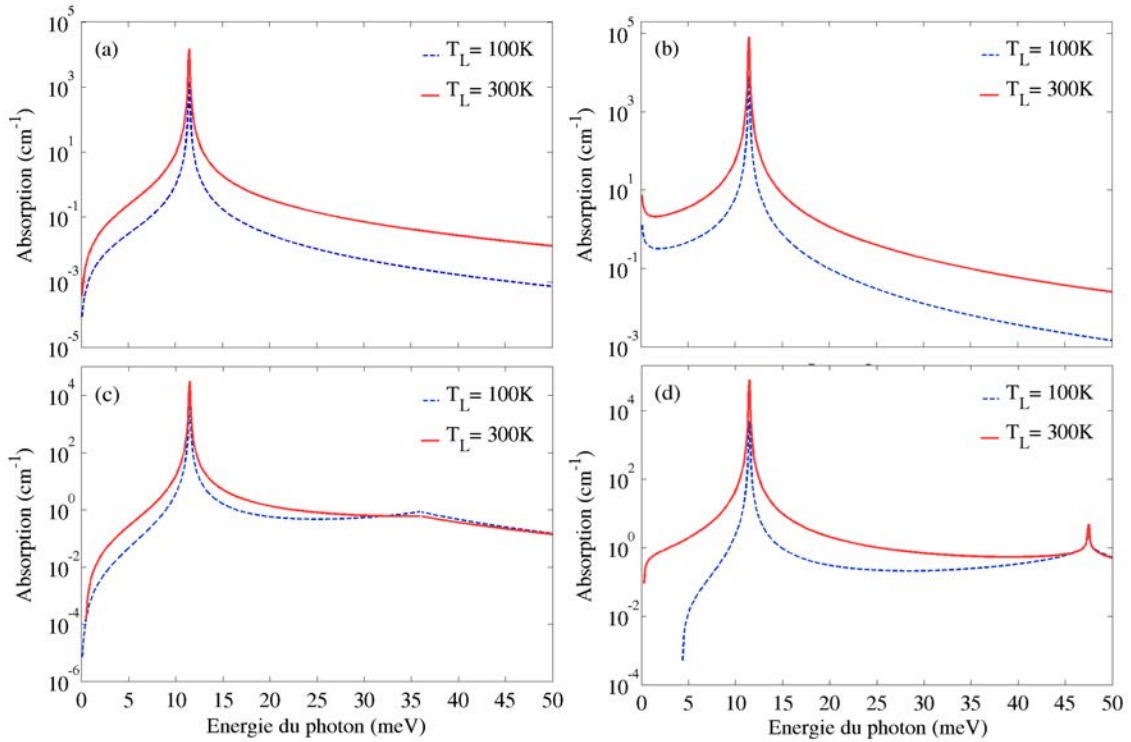


FIGURE II.14 – Coefficient d'absorption par porteurs libres assistée par l'interaction électron-phonon LO. Panneaux supérieurs : absorption d'un phonon LO ($\alpha_{nm}^{\text{LOabs}}$). Les graphes a et b correspondent aux transitions intra-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$ et inter-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |3\vec{k}'\rangle$ respectivement. Panneaux inférieurs : émission d'un phonon LO ($\alpha_{nm}^{\text{LOemi}}$). Les graphes c et d correspondent aux transitions intra- et inter-sousbande respectivement. Deux températures du réseau sont considérées : $T_L = 100$ K (pointillé bleu) et $T_L = 300$ K (continu rouge). $E_3 - E_2 = 11.46$ meV. $n_e = 2.17 \times 10^{10}$ cm $^{-2}$. $\hbar\omega_{\text{LO}} = 36$ meV. $T = T_L$. Structure 23/2/12 nm de GaAs/Al $_{0.15}$ GaAs $_{0.85}$.

Une autre caractéristique importante de ces résultats est la présence de résonances secondaires aux énergies $\hbar\omega = 36$ meV et $\hbar\omega = 47.46$ meV pour l'émission de phonon LO (observées respectivement sur les graphes II.14.c et II.14.d). Ces énergies correspondent soit à l'énergie d'un phonon LO ($\hbar\omega = \hbar\omega_{\text{LO}} = 36$ meV), soit à la réplique phonon LO qui a lieu exactement à l'énergie $\hbar\omega = E_m - E_n + \hbar\omega_{\text{LO}} =$

47.46 meV. Comme le montre schématiquement la figure II.15, à cette énergie précise, le photon possède exactement l'énergie nécessaire à l'électron pour transiter vers la sous-bande supérieure en émettant un phonon LO de vecteur d'onde $\vec{q} = 0$. La transition ainsi effectuée est alors verticale dans l'espace des vecteurs d'onde \vec{k} et une divergence dans l'élément de matrice de Fröhlich apparaît². Concernant la résonance secondaire de la transition intra-sousbande (à l'énergie $\hbar\omega = 36$ meV), l'électron possède exactement l'énergie nécessaire pour émettre un phonon LO de vecteur d'onde nul sans changer de sous-bande. Notons qu'en principe, une autre réplique de phonon LO a lieu à l'énergie $\hbar\omega = E_m - E_n - \hbar\omega_{LO}$ pour l'absorption de phonon LO. Celle-ci se situant à basse énergie, elle ne peut être observée dans le cas présent car $E_m - E_n < \hbar\omega_{LO}$ pour cette structure.

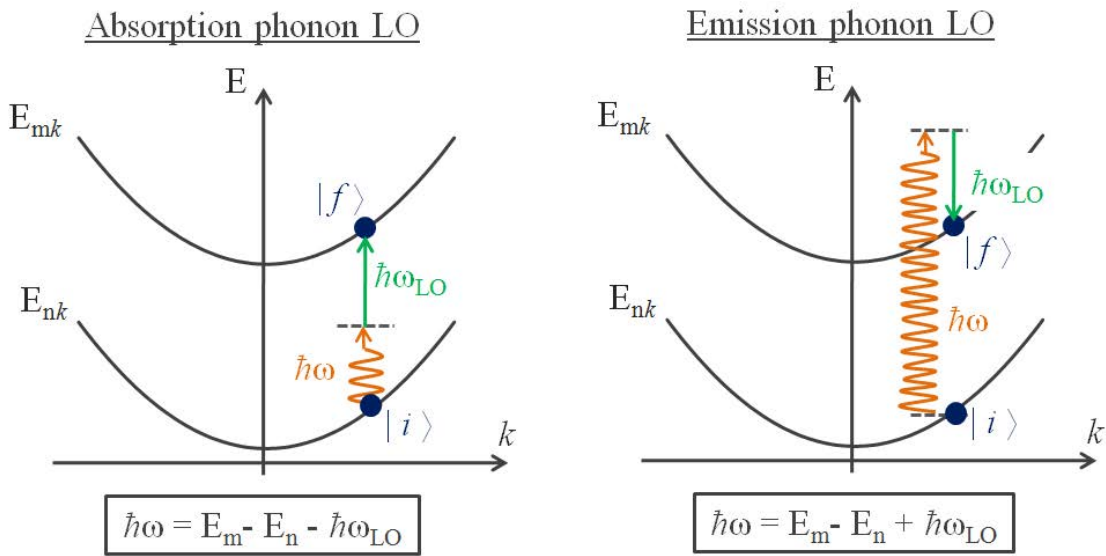


FIGURE II.15 – Représentation du processus de réplique de phonon LO dans le cas d'une absorption (schéma de gauche) et d'une émission (schéma de droite) de phonon LO lors d'une transition inter-sousbande. Les flèches oranges représentent l'interaction électron-photon. Les flèches vertes représentent le couplage électron-phonon LO à vecteur d'onde $\vec{q} = 0$. Les points bleus représentent les états finaux et initiaux réels de la transition oblique considérée. Les segments en pointillés gris représentent les niveaux d'énergie virtuels intermédiaires.

Il est également intéressant d'étudier l'effet d'une différence de température entre les électrons (T) et le réseau (T_L). La figure II.16 présente les résultats du calcul de α_{nm}^{LOabs} (graphe a) et α_{nm}^{LOemi} (graphe b) pour $T = 150$ K et $T_L = 100$ K. Cet écart de température a un effet très marqué sur l'intensité de l'absorption par porteurs libres, en particulier sur son signe, démontrant ainsi la possibilité d'obtenir du gain (absorption négative) [98]. En effet, le coefficient d'absorption devient négatif uniquement si le processus inverse des équations (II.37) et (II.38) devient dominant. Dans ce cas, $\alpha_{nm}^{LOabs}(\omega) \leq 0$ uniquement si l'argument de l'exponentielle dans le premier terme de l'expression (II.39) est positif. Ceci conduit alors à l'inégalité $T \geq T_L(1 + \omega/\omega_{LO})$, qui est une condition vérifiée si $T_L \neq T$. Au contraire, $\alpha_{nm}^{LOemi}(\omega) \leq 0$ uniquement si

2. Cette divergence en $\frac{1}{q}$ provient directement de la nature dipolaire non écrantée de cette interaction électron-phonon.

$T \leq T_L(1 - \omega/\omega_{LO})$ ce qui ne peut jamais se produire car $T \geq T_L$. Pour $T = 150$ K et $T_L = 100$ K, on observe donc un coefficient d'absorption $\alpha_{nm}^{LO,abs}$ négatif pour des énergies de photon $\hbar\omega \leq \hbar\omega_{LO} \left(\frac{T}{T_L} - 1 \right) = 18$ meV tandis qu'avec $T = T_L$ (figure II.14) $\alpha_{nm}^{LO,abs} > 0$. Par ailleurs, sa valeur absolue décroît avec l'énergie car le facteur d'occupation domine le comportement de la courbe (encore une fois ce n'est pas le cas lorsque $T = T_L$).

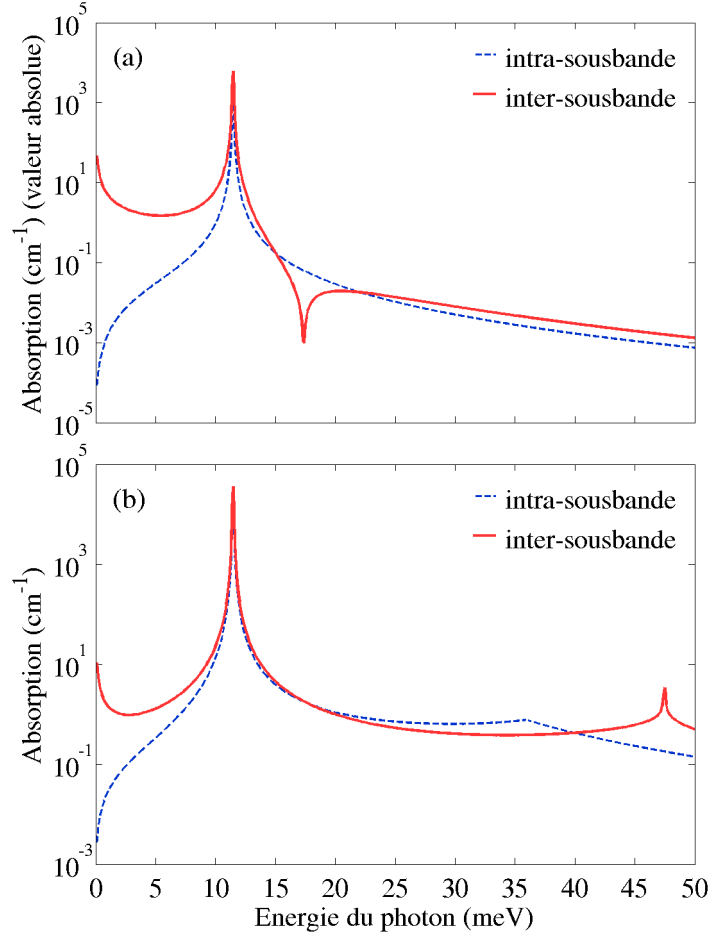


FIGURE II.16 – Coefficient d'absorption par porteurs libres $\alpha_{nm}^{LO,abs/em}$ assistée par (a) l'absorption et (b) l'émission de phonon LO. Les contributions associées aux transitions intra-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$ (pointillé bleu) et inter-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |3\vec{k}'\rangle$ (continu rouge) sont représentées. $T_L = 100$ K et $T = 150$ K. $E_3 - E_2 = 11.46$ meV. $n_e = 2.17 \times 10^{10}$ cm⁻². $\hbar\omega_{LO} = 36$ meV. Structure 23/2/12 nm de GaAs/Al_{0.15}GaAs_{0.85}.

Enfin, comme obtenu dans le cas de processus élastiques assistant l'absorption par porteurs libres, les processus inter-sousbande dominant ici aussi les processus intra-sousbande. L'absorption et l'émission de phonon LO donnent des valeurs de pertes comparables même si l'un de ces mécanismes, l'émission de phonon LO, est toujours possible quelque soit la température T_L . Tandis que l'autre, l'absorption de phonon LO, nécessite un facteur N_q important pour être activé.

Phonons acoustiques longitudinaux

Nous pouvons désormais reprendre le calcul précédent relatif aux phonons LO pour traiter le cas de l'absorption par porteurs libres assistée par l'émission et l'absorption de phonons LA. Ceci revient alors à remplacer l'interaction de Fröhlich par le potentiel de déformation défini par les expressions (I.38) et (I.39).

Nous obtenons ainsi le coefficient d'absorption par absorption de phonon LA :

$$\alpha_{nm}^{\text{LAabs}}(\omega) = \frac{e^2 D^2 n_e}{16\pi^2 m^* \rho_s c_s^2 \varepsilon_0 c n_r L_z} \frac{|\langle 2|p_z|3 \rangle|^2}{\hbar\omega} R_{nm}^2(\omega) \times \left(I_{nm,K}^{\text{LAabs}}(\omega) + \frac{n_e \hbar^2 \pi}{2m^* k_B T} I_{nm,\Xi}^{\text{LAabs}}(\omega) \right) \quad (\text{II.50})$$

où $D = 8.6$ eV est le potentiel de déformation, $\rho_s = 5.3$ g.cm⁻³ la densité et $c_s = 3700$ m.s⁻¹ la vitesse longitudinale du son dans GaAs. De même ici, les fonctions $I_{nm,Q}^{\text{LAabs}}$ ($Q = K$ ou Ξ) sont définies par :

$$I_{nm,K}^{\text{LAabs}}(\omega) = \int dQ_z |F_{nm}^{\text{LAabs}}(Q_z)|^2 \int_0^\infty dx e^{-x} \int_0^{2\pi} d\theta N_q(\omega_{\text{LA}}) \omega_{\text{LA}}(K_{nm}) \times (1 - e^{-\beta\hbar\omega} e^{(\beta_L - \beta)\hbar\omega_{\text{LA}}(K_{nm})}) \quad (\text{II.51})$$

$$I_{nm,\Xi}^{\text{LAabs}}(\omega) = \int dQ_z |F_{nm}^{\text{LAabs}}(Q_z)|^2 \int_0^\infty dx e^{-x} \int_0^{2\pi} d\theta N_q(\omega_{\text{LA}}) \omega_{\text{LA}}(\Xi_{nm}) \times (e^{-\beta\hbar\omega} e^{(\beta_L - \beta)\hbar\omega_{\text{LA}}(\Xi_{nm})} - e^{\beta[\hbar\omega + \hbar\omega_{\text{LA}}(\Xi_{nm})]}) \quad (\text{II.52})$$

où Q_z est la composante suivant z du vecteur d'onde du phonon LA et où $N_q(\omega_{\text{LA}})$ désigne de nouveau le facteur d'occupation des phonons :

$$N_q(\omega_{\text{LA}}) = \frac{1}{e^{\beta_L \hbar\omega_{\text{LA}}(Q_{nm})} - 1} \quad (\text{II.53})$$

La dispersion des phonons LA est :

$$\hbar\omega_{\text{LA}}(Q_{nm}) = c_s \sqrt{Q_z^2 + Q_{nm}^2} \quad (\text{II.54})$$

pour laquelle la variation de vecteur d'onde $Q_{nm} = K_{nm}$ ou Ξ_{nm} vaut :

$$K_{nm}^2(x, \theta, \omega) = \frac{2m^*}{\hbar^2 \beta} \times \left[2x + \beta(\hbar\omega - E_m - E_n) - 2 \cos \theta \sqrt{x^2 + \beta x(\hbar\omega - E_m - E_n)} \right] \quad (\text{II.55})$$

$$\Xi_{nm}^2(x, \theta, \omega) = \frac{m^*}{\hbar^2 \beta} \times \left[2x + 2\beta(\hbar\omega - E_m - E_n) - 2 \cos \theta \sqrt{x^2 + 2\beta x(\hbar\omega - E_m - E_n)} \right] \quad (\text{II.56})$$

Ces deux expressions sont très similaires à (II.44) et (II.45). Seuls les préfacteurs tenant compte de la nature de l'interaction diffèrent ainsi que la dispersion

des phonons qui est donnée explicitement en (II.54). Notons également que nous avons appliqué l'approximation quasi-élastique permettant de ne pas tenir compte de l'énergie $\hbar\omega_{\text{LA}}$, petite devant $E_m - E_n$ ³, dans la conservation de l'énergie. Ainsi, les variations de vecteur d'onde Q_{nm} restent indépendantes de ω_{LA} .

Les facteurs de forme F_{nm}^{LA} tenant compte du recouvrement des fonctions d'onde impliquées dans la diffusion valent quant à eux :

$$F_{22}^{\text{LA}}(Q_z) = \int dz \chi_2(z) \chi_3(z) e^{-iQ_z z} \quad (\text{II.57})$$

$$F_{23}^{\text{LA}}(Q_z) = \int dz [\chi_3^2(z) - \chi_2^2(z)] e^{-iQ_z z} \quad (\text{II.58})$$

Un calcul similaire permet de déterminer le coefficient d'absorption par porteurs libres par émission de phonon LA :

$$\alpha_{nm}^{\text{LAemi}}(\omega) = \frac{e^2 D^2 n_e}{16\pi^2 m^* \rho_s c_s^2 \varepsilon_0 c n_r L_z} \frac{|\langle 2|p_z|3 \rangle|^2}{\hbar\omega} R_{nm}^2(\omega) \times \left[I_{nm,K}^{\text{LAemi}}(\omega) + \frac{n_e \hbar^2 \pi}{2m^* k_B T} I_{nm,\Xi}^{\text{LAemi}}(\omega) \right] \quad (\text{II.59})$$

où les fonctions $I_{nm,Q}^{\text{LAemi}}$ sont définies par :

$$I_{nm,K}^{\text{LAemi}} = \int dQ_z |F_{nm}^{\text{LA}}(Q_z)|^2 \int_0^\infty dx e^{-x} \int_0^{2\pi} d\theta [N_q(\omega_{\text{LA}}) + 1] \omega_{\text{LA}}(K_{nm}) \times [1 - e^{-\beta\hbar\omega} e^{(\beta-\beta_L)\hbar\omega_{\text{LA}}(K_{nm})}] \quad (\text{II.60})$$

$$I_{nm,\Xi}^{\text{LAemi}} = \int dQ_z |F_{nm}^{\text{LA}}(Q_z)|^2 \int_0^\infty dx e^{-x} \int_0^{2\pi} d\theta [N_q(\omega_{\text{LA}}) + 1] \omega_{\text{LA}}(Q_{nm}) \times [e^{-\beta\hbar\omega} e^{(\beta-\beta_L)\hbar\omega_{\text{LA}}(\Xi_{nm})} - e^{\beta[\hbar\omega - \hbar\omega_{\text{LA}}(\Xi_{nm})}]] \quad (\text{II.61})$$

ou cette fois-ci, du à l'utilisation de l'approximation de diffusion quasi-élastique, la variation de vecteur d'onde $Q_{nm} = K_{nm}$ ou Ξ_{nm} pour l'émission est la même que celle pour l'absorption de phonon LA (expressions (II.55) et (II.56)).

Par analogie à la figure II.14, les graphes de la figure II.17 montrent l'évolution des coefficients d'absorption $\alpha_{nm}^{\text{LAabs}}$ et $\alpha_{nm}^{\text{LAemi}}$ à $T = T_L$. Encore une fois, les énergies de phonons mises en jeu ici étant relativement faibles par rapport aux autres énergies caractéristiques du système (notamment la différence d'énergie $E_3 - E_2$), nous retrouvons ici un résultat quantitatif proche de celui des diffuseurs élastiques tels que les défauts d'interface. En effet, de par leur dispersion linéaire, les phonons LA se comportent comme des diffuseurs quasi-élastiques dans les structures de type LCQ. Notons néanmoins une dépendance thermique similaire à celle des phonons LO, provenant encore une fois de la dépendance linéaire en fonction du facteur de Bose N_q et de son évolution en température.

3. Ces énergies de phonons sont typiquement de l'ordre du meV pour les structures à cascade typiques.

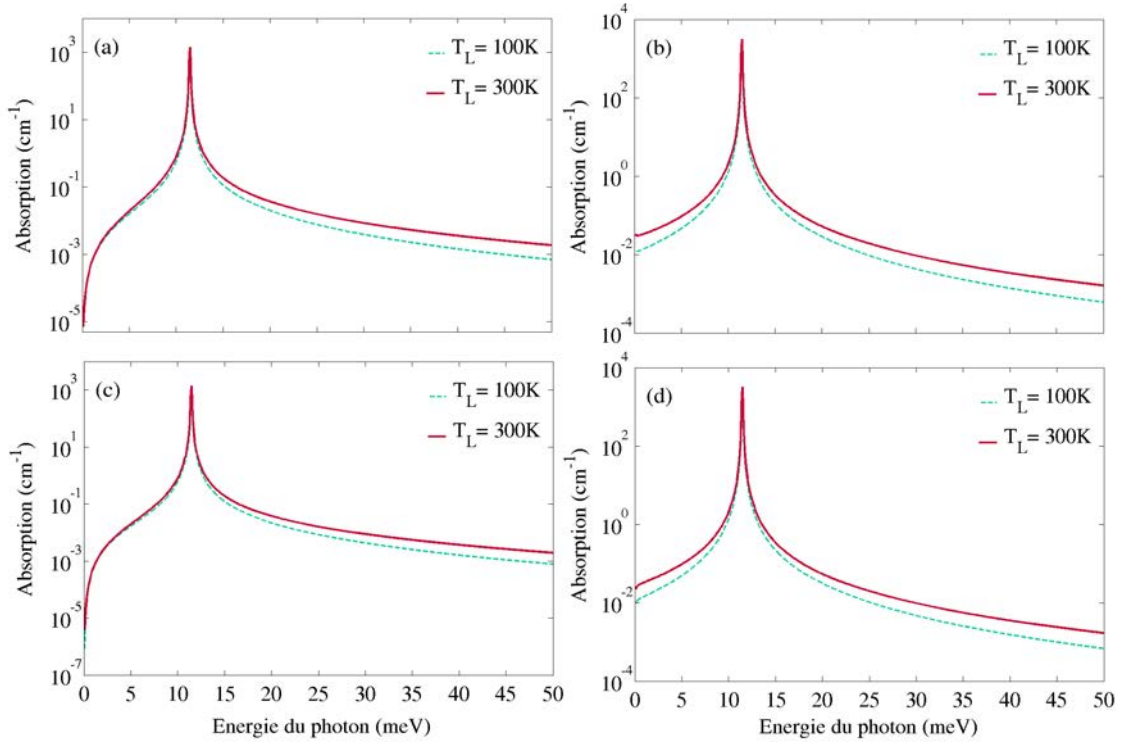


FIGURE II.17 – Coefficient d'absorption par porteurs libres assistée par l'interaction électron-phonon LA. Panneaux supérieurs : absorption d'un phonon LA (α_{nm}^{LAabs}). Les graphes a et b correspondent aux transitions intra-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$ et inter-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |3\vec{k}'\rangle$ respectivement. Panneaux inférieurs : émission d'un phonon LA (α_{nm}^{LAemi}). Les graphes c et d correspondent aux transitions intra- et inter-sousbande respectivement. Deux températures du réseau sont considérées : $T_L = 100$ K (pointillé vert) et $T_L = 300$ K (continu rouge). $E_3 - E_2 = 11.46$ meV. $n_e = 2.17 \times 10^{10}$ cm $^{-2}$. $D = 8.6$ eV. $T = T_L$. Structure 23/2/12 nm de GaAs/Al $_{0.15}$ GaAs $_{0.85}$.

Retenons finalement que l'absorption par porteurs libres assistée par les diffuseurs inélastiques croît à mesure que la température du système augmente et reste largement dominée par l'absorption/émission de phonon LO pour des structures à cascade quantique typiques.

II.3.4 Evolution en température

Dans les sections précédentes nous avons évalué le coefficient d'absorption par porteurs libres assistée aussi bien par les diffuseurs élastiques qu'inélastiques. Il est désormais intéressant de reprendre ces calculs et d'évaluer ces pertes pour une structure de LCQ réelle afin de comparer l'efficacité relative de ces différents processus de diffusion.

Nous avons déterminé les coefficients d'absorption en présence de défauts d'interface, d'impuretés ionisées, de désordre d'alliage et par absorption de phonon LO pour la structure de triple puits quantique ternaire 12.5/0.9/11.7/2.6/21.0 nm d'In $_{0.53}$ Ga $_{0.43}$ As/GaAs $_{0.51}$ Sb $_{0.49}$. Cette structure correspond à la zone active d'un LCQ THz réalisé expérimentalement par Deustch *et al.* [105]. La rugosité d'interface est introduite sur les six interfaces internes du triple puits. Le puits injecteur

de 21 nm d'épaisseur est uniformément dopé à une concentration $n_e = n_{\text{imp}} = 1.6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Conformément aux remarques de la section II.3.2, le désordre d'alliage est pris en compte uniquement dans les puits d'InGaAs. L'énergie de phonon LO vaut quant à elle $\hbar\omega_{\text{LO}} = 34 \text{ meV}$. L'émission laser a lieu à l'énergie $E_4 - E_3 = 15.3 \text{ meV}$ et pour nos calculs de perte par porteurs libres, nous nous intéressons à la transition inter-sousbande oblique $|4\vec{k}\rangle \rightarrow |5\vec{k}'\rangle$ ($E_5 - E_4 = 53 \text{ meV}$) [54].

Le résultat de ces calculs est montré sur la figure II.18 pour deux températures $T = 100 \text{ K}$ et 300 K (ici $T = T_L$). Pour cette structure à trois puits quantiques, la diffusion par défauts d'interface est le processus élastique dominant. En effet, le nombre élevé d'interfaces et les faibles épaisseurs de barrières (0.9 nm et 2.6 nm) augmente considérablement l'efficacité de diffusion par ces défauts car les fonctions d'onde restent fortement localisées aux interfaces puit/barrière. Par ailleurs, comme nous l'avons souligné au chapitre I, l'épaisseur des défauts d'interface h_{def} dans les structures ternaires est connue pour être supérieure à celle des composés binaires III-V⁴, augmentant alors davantage la probabilité de diffusion.

Le désordre d'alliage apporte lui aussi une contribution importante. Ce résultat est typique des structures ternaires [70] pour lesquelles le pourcentage d'alliage est proche de 0.5 (ici $x_{\text{alloy}} = 0.51$ dans les puits) maximisant ainsi l'efficacité de ce potentiel.

Bien que la température T apparaisse à plusieurs reprises dans les expressions de ces différents coefficients d'absorption, la contribution thermique principale est le terme $(1 - e^{-\beta\hbar\omega})$ provenant des facteurs de population. Ce terme tend à diminuer l'absorption par porteurs libres à haute température. Physiquement, celui-ci représente la contribution de l'émission stimulée, croissante en température, qui tend à réduire le bilan net d'absorption. L'asymétrie des courbes autour de la résonance $\hbar\omega = E_5 - E_4$ s'explique par un argument similaire. Comme attendu, une augmentation de la contribution des phonons LO à haute température est observée. Par ailleurs, pour cette structure où $E_m - E_n > \hbar\omega_{\text{LO}}$ ($\hbar\omega_{\text{LO}} = 34 \text{ meV}$ dans ce composé ternaire), la réplique d'absorption de phonon LO décrite en section II.3.3 est observée à l'énergie $\hbar\omega = E_5 - E_4 - \hbar\omega_{\text{LO}} \approx 19 \text{ meV}$.

Un point important à noter est le fait que l'absorption par défauts d'interface et par impuretés ionisées est extrêmement faible à basse énergie pour la température la plus basse ($T = 100 \text{ K}$). Les courbes de la figure II.18 montrent un coefficient d'absorption α^{def} et α^{imp} quasi-nul pour $\hbar\omega < 15 \text{ meV}$. Comme le montre schématiquement la figure II.19, ceci s'explique par le fait que pour ces énergies-ci, aucun état de la sous-bande finale supérieure n'est accessible pour une faible variation de vecteur d'onde. Pour ces transitions, un grand transfert de vecteur d'onde est requis, abaissant alors la probabilité de transition. Les transitions sont alors bloquées et les pertes très faibles. En revanche, à plus haute température, des états initiaux d'énergie supérieure sont peuplés, rendant alors possible la transition inter-sousbande. À $T = 300 \text{ K}$, les courbes de la figure II.18 montrent bien un coefficient $\alpha > 0 \forall \hbar\omega$. Les transitions inter-sousbande sont alors activées thermiquement.

4. Pour ces structures ternaires, nous considérons deux monocouches pour l'épaisseur h_{def} .

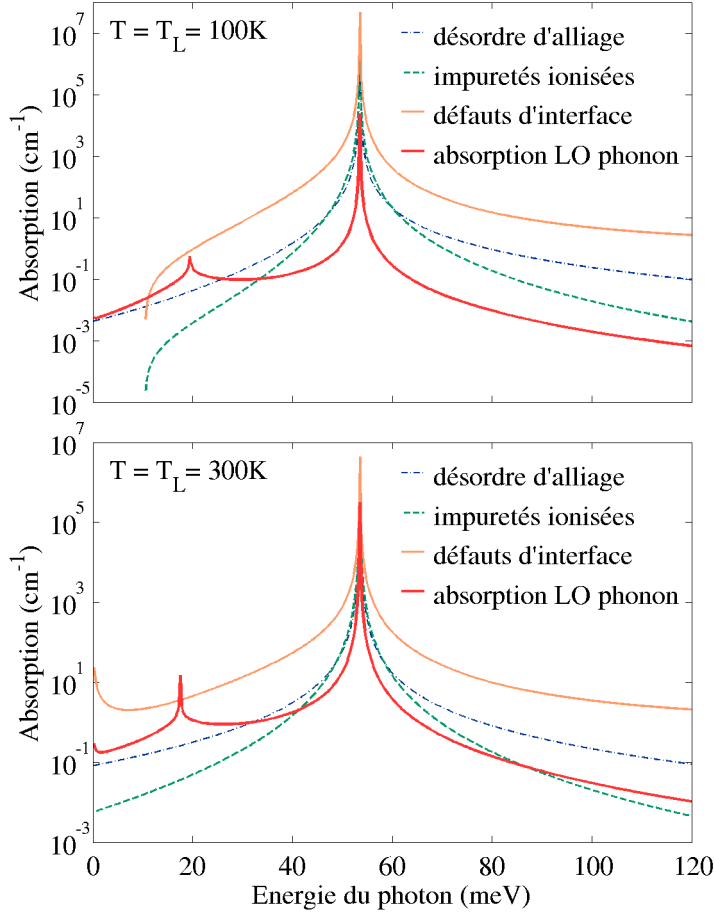


FIGURE II.18 – Coefficient d’absorption par porteurs libres en fonction de l’énergie du photon absorbé associé à la transition inter-sousbande oblique $|4\vec{k}\rangle \rightarrow |5\vec{k}'\rangle$ de la zone active du LCQ THz réalisé par Deustch *et al.* [105]. Plusieurs mécanismes de diffusion sont considérés : le désordre d’alliage (pointillé bleu), les impuretés ionisées (pointillé vert), les défauts d’interface (continu orange) et l’absorption de phonon LO (continu rouge). $T = 100$ K (graphe supérieur) et $T = 300$ K (graphe inférieur). $E_5 - E_4 = 53$ meV. $n_{\text{imp}} = n_e = 1.5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $f_{\text{def}} = 0.30$, $\sigma = 3.6$ nm et $h_{\text{def}} = 5.66$ Å. $N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = N_{\text{def}}/2$. $\Delta V = 0.6$ eV et $x = 0.51$.

Notons que cet effet ne concerne ni l’absorption de phonon LO, ni le désordre d’alliage. Dans le premier cas, ce mécanisme inélastique est toujours possible dès lors qu’il y a des phonons prêts à être absorbés dans le système. Le facteur limitant étant la température du réseau T_L qui contrôle l’occupation des phonons LO⁵. Dans le second cas, bien que le mécanisme d’absorption soit le même que pour les autres diffuseurs élastiques, le potentiel de désordre a l’avantage d’être indépendant du vecteur d’onde \vec{k} (diffuseurs “delta”). Ainsi, tous les transferts de vecteur d’onde $\Delta\vec{k}$ sont possibles, contrairement au cas des défauts ou des impuretés pour lesquels l’échange $\Delta\vec{k}$ est limité respectivement par l’extension spatiale σ^{-1} des défauts ou par $(a^*)^{-1}$ le rayon de Bohr effectif.

5. Rappelons que l’émission de phonon LO est toujours possible, quelque soit la température de réseau.

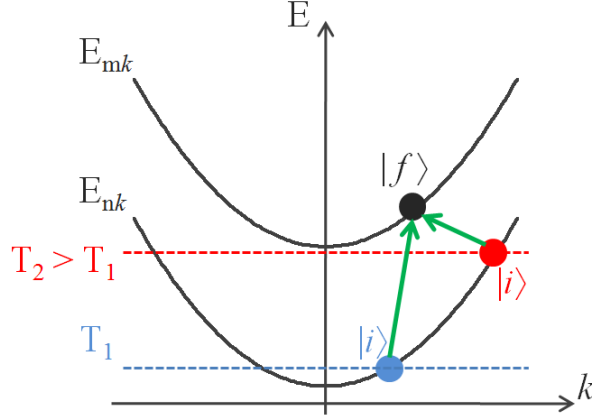


FIGURE II.19 – Schéma de l'activation thermique des processus inter-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |m\vec{k}'\rangle$ d'absorption par porteurs libres médiée par les diffuseurs élastiques. Les points bleu et rouge représentent les états initiaux de la transition en sous-bande n thermalisée à T_1 et T_2 respectivement ($T_1 < T_2$). Le point noir représente l'état final de la transition oblique en sous-bande m . Un électron initialement thermalisé à la température T_1 en sous-bande n nécessite un plus grand transfert de vecteur d'onde de la part du diffuseur pour atteindre l'état final en sous-bande supérieure m qu'un électron thermalisé à la température $T_2 > T_1$.

Enfin, notons que les processus intra-sousbande sont toujours possibles, quelque soit la température et l'énergie du photon absorbé.

Pour cette structure, les pertes réelles d'absorption par porteurs libres sont évaluées à l'énergie $\hbar\omega = \hbar\omega_{\text{las}} = 15.3 \text{ meV}$. Celles-ci s'élèvent à quelques cm^{-1} à 300 K. Le désordre d'alliage et la rugosité d'interface dominent les diffusions élastiques mais il est clair qu'une telle comparaison ne peut se généraliser à toutes les structures puisque, comme nous l'avons établi dans les expressions précédentes, l'efficacité de ces processus de pertes dépend non seulement du matériau, de la température mais également de la structure elle-même à travers les termes de localisation/délocalisation et du recouvrement des fonctions d'onde impliquées ; ou bien encore à travers le nombre d'interfaces rugueuses ou la position des dopants dans l'hétérostructure.

II.3.5 Polarisation dans le plan des couches

Précédemment, nous avons traité le cas d'un modèle perturbatif décrivant l'absorption par porteurs libres dans les LCQ, en considérant alors le cas d'une polarisation de la lumière standard pour ces systèmes : les ondes électromagnétiques se propagent dans le plan des couches et le champ électrique de l'onde lumineuse est parallèle à l'axe de croissance (z). Dans ce dernier paragraphe, nous étendons notre modèle au cas de structures à multi-puits quantiques pour lesquelles l'onde électromagnétique se propage suivant l'axe de croissance et dont le champ électrique associé est polarisé dans le plan des couches [106]. Notons que pour une telle configuration de polarisation de la lumière, l'onde électromagnétique se propage dans un milieu inhomogène et par conséquent, aucun coefficient d'absorption ne peut être défini comme précédemment pour les LCQ ou comme habituellement pour les matériaux massifs. Nous nous limitons donc ici à l'évaluation du taux de perte d'énergie P_{nm}

pour des transitions obliques intra- et inter-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |m\vec{k}'\rangle$. Pour une polarisation normale à l'axe de croissance et en présence de diffuseurs élastiques, celui-ci s'écrit :

$$P_{nm} = \frac{\pi e^2 E_{\text{em}}^2}{m^* \omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} (f_{n\vec{k}} - f_{m\vec{k}'}) |\langle \Psi_{m\vec{k}'} | p_{\perp} | \Psi_{n\vec{k}} \rangle|^2 \delta(\varepsilon_{m\vec{k}'} - \varepsilon_{n\vec{k}} - \hbar\omega) \quad (\text{II.62})$$

où $p_{\perp} = p_{x,y}$ est l'élément dipolaire associé à cette nouvelle polarisation dans le plan des couches de croissance. Nous traitons dans la suite l'absorption assistée par les défauts d'interface, les impuretés ionisées et le désordre d'alliage présents dans une structure de double puits quantique ternaire 26/3.1/12.6 nm d' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ / $\text{GaAs}_{0.51}\text{Sb}_{0.49}$ et comme précédemment, nous nous intéressons aux transitions $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$ et $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |3\vec{k}'\rangle$ ($E_3 - E_2 = 6.8$ meV).

Par un développement des états perturbés $\Psi_{n\vec{k}}$ et $\Psi_{m\vec{k}'}$ analogue à celui établi en section II.3.2, nous pouvons évaluer l'élément de matrice dipolaire de (II.62) :

$$|\langle \Psi_{m\vec{k}'} | p_{\perp} | \Psi_{n\vec{k}} \rangle|^2 = \frac{|\langle m\vec{k}' | V_{\text{dis}} | n\vec{k} \rangle|^2}{\omega^2} (k_{\perp} - k'_{\perp})^2 \quad (\text{II.63})$$

où $k_{\perp} = k_{x,y}$ est le vecteur d'onde de l'électron. Par un calcul similaire au précédent en polarisation suivant z , nous obtenons les différents taux de perte d'énergie respectifs aux transitions médiées par les défauts d'interface, les donneurs coulombiens et le désordre d'alliage :

$$P_{nm}^{\text{def}}(\omega) = \frac{\pi e^2 E_{\text{em}}^2 \sigma^4 V_b^2}{\omega^3 \hbar^2 m^*} n_e (1 - e^{-\beta \hbar \omega}) \Lambda_{nm}^{\text{def}} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} du e^{-u} e^{-\sigma^2 q_{nm}^2(u)} q_{nm}^2(u) \quad (\text{II.64})$$

$$P_{nm}^{\text{imp}}(\omega) = \frac{e^6 E_{\text{em}}^2 n_{\text{imp}}}{16 \omega^3 \hbar^2 m^* (\varepsilon_0 \varepsilon_r)^2} n_e (1 - e^{-\beta \hbar \omega}) \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} du e^{-u} |\Lambda_{nm}^{\text{imp}}(q_{nm}(u))|^2 \quad (\text{II.65})$$

$$P_{nm}^{\text{alloy}}(\omega) = \frac{e^2 E_{\text{em}}^2 x_{\text{alloy}} (1 - x_{\text{alloy}}) \Delta V^2 \Omega_0}{\omega^3 \hbar^2 m^*} n_e (1 - e^{-\beta \hbar \omega}) \Lambda_{nm}^{\text{alloy}} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} du e^{-u} q_{nm}^2(u) \quad (\text{II.66})$$

pour lesquels l'échange de vecteur d'onde est :

$$q_{nm}(u) = \frac{2m^*}{\beta \hbar^2} \left[2u + \beta(\hbar\omega - E_{nm}) - 2 \cos \theta \sqrt{u} \sqrt{(u + \beta(\hbar\omega - E_m + E_n))} \right] \quad (\text{II.67})$$

avec $u = \frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m^*}$ et où :

$$\Lambda_{nm}^{\text{def}} = \sum_{z_0} \left(n_{\text{att}} \left| \int_{z_0-h}^{z_0} dz \chi_n(z) \chi_m(z) \right|^2 + n_{\text{rep}} \left| \int_{z_0}^{z_0+h} dz \chi_n(z) \chi_m(z) \right|^2 \right) \quad (\text{II.68})$$

$$\Lambda_{nm}^{\text{imp}}(q_{nm}(u)) = \int dz \chi_n(z) \chi_m(z) e^{-q_{nm}(u)|z-z_l|} \quad (\text{II.69})$$

$$\Lambda_{nm}^{\text{alloy}} = \int_{\text{alloy}} dz \chi_n(z)^2 \chi_m(z)^2 \quad (\text{II.70})$$

La figure II.20 montre l'évolution de ces différents taux de perte d'énergie en fonction de l'énergie du photon pour les mêmes paramètres de désordre utilisés dans la section II.3.2 et pour les transitions intra- (graphe a) et inter-sousbande (graphe d). Ici, $E_{\text{em}} = 1 \text{ kV.cm}^{-1}$. Les donneurs sont placés sur un plan unique à la position $z_l = 10 \text{ nm}$ dans la structure. Les graphes II.20.a et II.20.c présentent une dépendance en $\hbar\omega$ de type ω^{-p} où la valeur de l'exposant $p > 0$ dépend du type de diffuseurs considérés. En effet, dans cette configuration, les états de conduction sont étendus dans le plan des couches et le mouvement "libre" des porteurs a lieu dans le même plan que celui de la direction du champ électrique de l'onde lumineuse. Par conséquent, ces processus d'absorption peuvent de nouveau être estimés par une description semi-classique de type modèle de Drude pour laquelle l'hypothèse que les porteurs sont bien accélérés par la force électrique $-e\vec{E}_{\text{em}}$ reste valide. Le comportement semi-classique caractéristique du modèle de Drude est alors retrouvé pour ce système quasi-2D et pour cette configuration de polarisation précise.

Nous notons également que l'intensité du taux de perte d'énergie des transitions intra-sousbande est d'un ordre de grandeur supérieur à celui des transitions inter-sousbande correspondantes. Cet écart peut de nouveau s'expliquer par le fait que les termes de recouvrement Λ_{nm} des fonctions d'onde sont ici plus importants pour les processus intra-sousbande. De plus, l'élément de matrice dipolaire inter-sousbande $\langle n\vec{k}|p_{\perp}|m\vec{k}'\rangle = \delta_{n,m}\delta_{\vec{k},\vec{k}'}\hbar k_{\perp}$ conduit à des transitions inter-sousbande qui sont cette fois-ci "doublement interdites" dans un système idéal tandis que les transitions intra-sousbande sont désormais interdites uniquement par la conservation du vecteur d'onde. Il s'agit de la tendance opposée à celle que nous avons obtenue et démontrée dans le cas d'une polarisation le long de l'axe z . Ceci explique également le fait que, loin de la résonance, le taux de perte d'énergie intra-sousbande en polarisation z est d'au moins deux ordres de grandeur plus faible que celui en polarisation parallèle au plan des couches de croissance (voir graphes II.20.b et II.20.d pour comparaison). Les processus inter-sousbande conduisent quant à eux à des taux de perte d'énergie similaires pour les deux polarisations. Cette dernière étude démontre une anisotropie très forte de l'allure et des valeurs de l'absorption par porteurs libres en fonction de la polarisation de l'onde électromagnétique incidente. Et enfin, les graphes de la figure II.20 montrent que le désordre d'alliage est encore une fois le diffuseur dominant pour ce type d'alliage ternaire.

II.4 Conclusion

Dans ce deuxième chapitre, nous avons développé un modèle perturbatif de pertes par porteurs libres dans les hétérostructures quasi-2D de type structures à cascade quantique. Ce phénomène d'absorption des photons laser par les porteurs de la zone active est strictement interdit dans un système idéal car l'énergie et le vecteur d'onde ne peuvent être simultanément conservés à cause de l'invariance par translation dans le plan des couches de croissance. Celui-ci est en revanche activé par les imperfections présentes dans les structures réelles (désordre statique, phonons) et résulte de transitions intra- et inter-sousbande obliques dans l'espace des vecteurs d'onde \vec{k} , nécessitant alors un couplage virtuel aux sous-bandes excitées. Théoriquement, ce

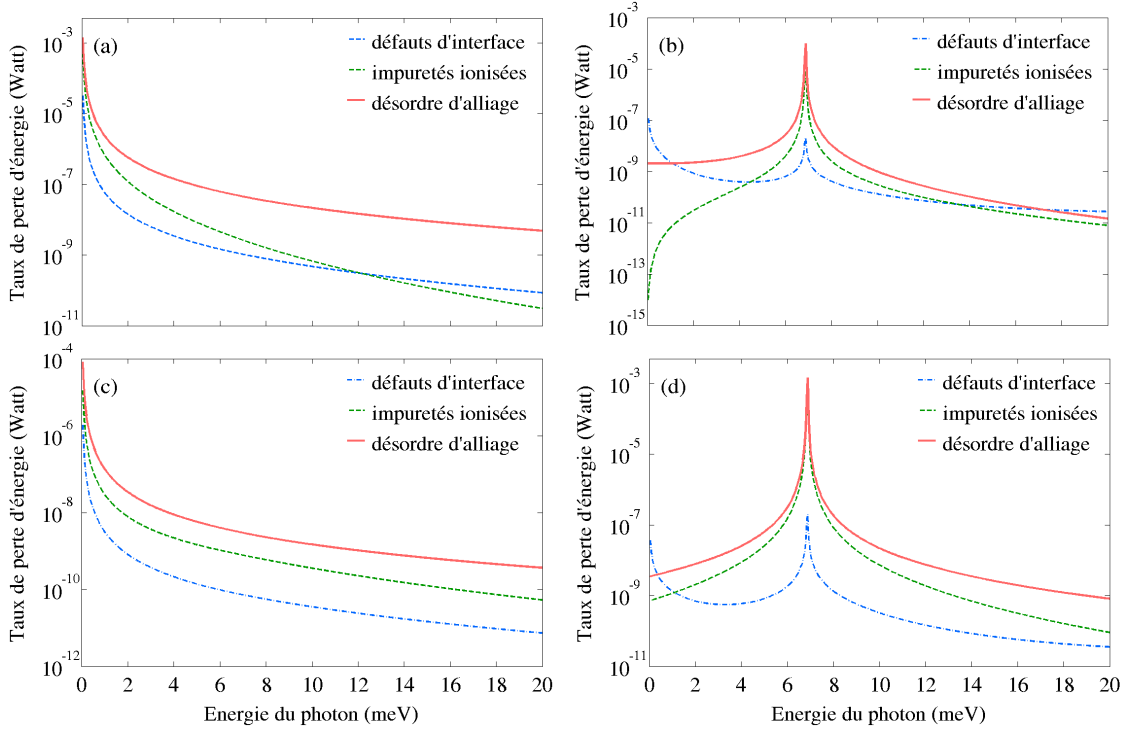


FIGURE II.20 – Taux de perte d'énergie en fonction de l'énergie du photon absorbé. Panneaux de gauche : le champ électrique de l'onde électromagnétique est polarisé dans le plan des couches. Les graphes (a) et (c) correspondent aux transitions intra-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$ et inter-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |3\vec{k}'\rangle$ respectivement. Panneaux de droite : le champ électrique de l'onde électromagnétique est polarisé suivant l'axe de croissance. Les graphes (b) et (d) correspondent aux transitions intra- et inter-sousbande respectivement. Plusieurs diffuseurs élastiques sont considérés : les défauts d'interface (pointillé bleu), les impuretés ionisées (pointillé vert) et le désordre d'alliage (continu rouge). $E_3 - E_2 = 6.8$ meV. $n_{\text{imp}} = n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $f_{\text{def}}=0.30$, $\sigma = 5.6$ nm et $h_{\text{def}} = 2.83$ Å. $N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = N_{\text{def}}/2$. $\Delta V = 0.6$ eV et $x = 0.51$. $T = 100$ K. Structure 26/3.1/12.6 nm d' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{GaAs}_{0.51}\text{Sb}_{0.49}$.

phénomène peut donc être traité en perturbation comme un processus quantique du second ordre impliquant le couplage de l'électron avec le photon laser absorbé et avec le diffuseur qui assiste la transition en fournissant la variation de vecteur d'onde nécessaire.

Nous avons tout d'abord soulevé la difficulté conceptuelle à extrapoler le modèle semi-classique de Drude aux structures quasi-2D, modèle encore largement utilisé pour l'estimation des pertes par porteurs libres dans les LCQ. Puis, à partir d'un développement perturbatif des états électroniques au premier ordre du potentiel de diffusion, nous avons décrit quantitativement les mécanismes de transitions obliques. Grâce à cette approche quantique, nous avons également déterminé le coefficient d'absorption par porteurs libres propre à chaque diffuseur. En configuration de polarisation standard pour les LCQ, c'est-à-dire avec un champ électrique de l'onde électromagnétique parallèle à l'axe de croissance, ce calcul prédit une évolution du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie du photon bien différente de celle donnée par le modèle semi-classique de Drude. Notre approche conduit également à des valeurs de pertes par porteurs libres très faibles pour les énergies de photon,

les paramètres de désordre et pour les températures de fonctionnement typiques des LQC THz que nous avons considérés. Nous avons en particulier démontré que les transitions inter-sousbande obliques sont, si énergétiquement possibles, des processus plus efficaces pour la réabsorption des photons laser. Concernant l'efficacité et la contribution aux pertes des différents diffuseurs, notre analyse montre que les défauts d'interface et les impuretés restent des sources de pertes relativement peu efficaces malgré leur temps caractéristique de diffusion relativement court, et que le désordre d'alliage apporte une contribution dominante dans les structures ternaires. L'interaction électron-phonon LO domine quant à elle la diffusion inélastique et l'absorption par porteurs libres à haute température. Enfin, nous avons repris ce calcul perturbatif pour une polarisation du champ électrique de l'onde lumineuse dans le plan des couches de croissance. Cette étude a mis en évidence une anisotropie très marquée entre les deux configurations de polarisation tant sur la dépendance en fonction de l'énergie du photon du coefficient d'absorption que sur les contributions relatives aux deux types de transitions obliques. Tandis que la polarisation suivant z conduit à une absorption résonante à l'énergie de séparation inter-sousbande $E_m - E_n$, la polarisation suivant x (ou y) conduit à une dépendance de type ω^{-p} en accord avec les hypothèses semi-classiques de Drude qui peuvent, dans ce cas précis, être formulées.

Ce modèle perturbatif apporte une bonne description et des estimations correctes des pertes par porteurs libres loin de la résonance mais ne décrit pas de manière satisfaisante le comportement du système au voisinage de cette dernière ou encore dans le régime où $\omega\tau < 1$. Ces limites proviennent directement du développement au premier ordre des états électroniques de cette approche. Dans le chapitre suivant, nous analyserons la forme et la largeur de la raie d'absorption dans des structures à cascade quantique par un calcul numérique de diagonalisation exacte du Hamiltonien du système désordonné, prenant ainsi en compte tous les ordres de la série de perturbation dans le traitement du désordre.

Chapitre III

Largeur et forme de raie d'absorption

III.1 Introduction

Dans les hétérostructures à multi-puits quantiques couplés, l'absorption inter-sousbande est reliée à une variété de transitions intra- et inter-sousbande [83, 95, 107]. En absence de désordre et pour une onde électromagnétique polarisée dans le long de l'axe de croissance z , la dépendance en énergie du coefficient d'absorption est une fonction de Dirac centrée à l'énergie de séparation inter-sousbande $\hbar\omega_0$ [108]. Ce profil de raie atomique résulte du fait que le couplage au photon, qui n'affecte pas le mouvement des électrons dans le plan des couches de croissance, requiert un dipole suivant z non nul [40, 58]. Rappelons qu'à cause de l'invariance par translation dans le plan, les mouvements des électrons sont identiques au sein des deux sous-bandes et sont généralement décrits par des fonctions d'onde planes à deux dimensions. Leurs énergies sont quant à elles données par des dispersions paraboliques, également identiques aux deux sous-bandes dès lors que les effets de non-parabolicité sont négligés.

Le désordre affecte le mouvement des porteurs dans le plan des couches de croissance ainsi que leurs énergies en introduisant des couplages aussi bien intra- qu'inter-sousbande [109]. De plus, en présence de diffuseurs attractifs, des états liés apparaissent généralement en-dessous du minimum de sous-bande [110]. Par conséquent, les règles de sélection optiques strictes qui conduisent à une raie delta ne sont désormais plus attendues dans le cas d'une structure désordonnée. La forme de la raie d'absorption inter-sousbande résulte alors de deux effets combinés. Le désordre dynamique et statique élargit les états d'énergie propres du système [60] et brise simultanément l'invariance par translation dans le plan des couches, ce qui conduit à la possibilité d'observer des transitions obliques [17, 98]. Ces effets sont fréquemment pris en compte à travers des élargissements effectifs des niveaux d'énergie [61].

Dans ce troisième chapitre, nous traitons l'absorption d'une structure à cascade quantique d'un point de vue complètement microscopique, en considérant les états exacts d'un potentiel de désordre. Ces états sont déterminés par diagonalisation numérique du Hamiltonien du système désordonné, au-delà de l'approximation de Born. Cette approche permet une analyse complète des processus quantiques sous-jacents qui conduisent à l'absorption du photon, pas uniquement au voisinage de la résonance $\hbar\omega_0$ mais aussi à haute et à basse énergie. Ces deux régions du spectre d'absorption bénéficient rarement d'une analyse approfondie dans la littérature malgré

leur intérêt technologique important. Après avoir exposé en détail notre méthode de diagonalisation numérique, nous nous intéresserons dans un premier temps au cas des défauts d'interface. En comparant notre approche perturbative développée au chapitre II, nous montrerons que l'absorption hors résonance, là où les pertes par porteurs libres contribuent majoritairement, peut être bien comprise par des processus de diffusion et nous analyserons le rôle précis des différents termes de couplage intra- et inter-sousbande. Cette approche numérique nous permettra également de discuter la limite de validité et la précision des différents modèles microscopiques couramment utilisés pour le calcul de l'absorption tels que les approches de fonctions de corrélation. Dans un second temps, nous nous intéresserons au cas des diffuseurs coulombiens issus du dopage de la structure. En particulier, nous mettrons en évidence la possibilité d'ajuster la forme et la largeur des raies d'absorption par une ingénierie de dopage, c'est-à-dire par un choix judicieux de la position des dopants dans l'hétérostructure. Nous concluons finalement ce chapitre par l'étude de la nature des transitions optiques entre états perturbés. Nous démontrerons que des quasi-règles de sélection optiques subsistent malgré la brisure d'invariance par translation par le désordre et que celles-ci contrôlent efficacement les largeurs de raie d'absorption inter-sousbande.

III.2 Diagonalisation exacte

En présence de désordre, la structure réelle est décrite par le Hamiltonien enveloppe H :

$$H = H_0 + V_{\text{dis}} = \frac{1}{2} \vec{p} \frac{1}{m^*(z)} \vec{p} + V_b(z) + V_{\text{dis}}(\vec{r}) \quad (\text{III.1})$$

Le Hamiltonien H_0 décrit la structure idéale et comprend le terme d'énergie cinétique et le potentiel de confinement $V_b(z)$. Le terme V_{dis} désigne de nouveau le potentiel de désordre généré ici par les diffuseurs élastiques tels que les défauts d'interface ($V_{\text{dis}} = V_{\text{def}}$) et les impuretés ionisées ($V_{\text{dis}} = V_{\text{imp}}$). Au chapitre précédent, l'interaction électron-diffuseur était prise en compte à travers un développement perturbatif des états électroniques idéaux $|n\vec{k}\rangle$ au premier ordre en V_{dis} . Désormais, l'effet du désordre est traité à tous les ordres par la diagonalisation numérique exacte du Hamiltonien H .

Pour tous les calculs et les résultats qui suivent, nous considérons la zone active d'un LCQ à design simple, constituée d'un double puits quantique asymétrique 9/2/3 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75}¹. Chaque période du LCQ est séparée de la suivante par une barrière d'épaisseur 5.6 nm. La longueur L_z d'une période est par conséquent de 19.6 nm. La structure de double puits quantique possède trois états liés pour le mouvement suivant z d'énergie respective $E_1 = 33.67$ meV, $E_2 = 107.47$ meV et $E_3 = 151.28$ meV [76, 103]. Dans la suite, nous nous intéressons aux transitions optiques $E_1 \rightarrow E_2$ dont la séparation en énergie dans le cas idéal s'élève à $E_2 - E_1 = 73.8$ meV.

1. Ces paramètres de matériau correspondent à des valeurs de masse effective $m_w^* = 0.067m_0$ pour les puits de GaAs et $m_b^* = 0.08775m_0$ pour les barrières d'AlGaAs. La hauteur de barrière correspondante est de $V_b = 217.5$ meV.

L'introduction du désordre statique dans la structure brise l'invariance par translation dans le plan des couches de croissance et donne lieu à deux types de couplage : les couplages électron-diffuseur entre états d'une même sous-bande (couplages intra-sousbande) et les couplages de mélange d'états issus de deux sous-bandes différentes (couplages inter-sousbande). Les termes intra-sousbande sont directement pris en compte par la diagonalisation de H réduit à une sous-bande. Par contre, pour tenir compte des termes de mélange inter-sousbande, il est impératif de développer H dans une base à plusieurs sous-bandes. Dans le cas présent, pour décrire les transitions $n = 1 \rightarrow n' = 2$, nous nous limitons à deux sous-bandes et nous diagonalisons H dans la base $\{|n\vec{k}_i\rangle\}$ où $n = 1, 2$ et i désigne l'indice de l'élément de base. $\{|n\vec{k}_i\rangle\}$ est la base d'ondes planes périodiques à deux dimensions qui vérifie les conditions aux limites de Born-von-Karman sur la surface de dimension $S = L_x \times L_y = 200 \times 200 \text{ nm}^2$:

$$|n\vec{k}_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{\rho}} \quad (\text{III.2})$$

avec $\vec{k}_i = (k_{ix}, k_{iy})$. L'espace des moments \vec{k} contient $N_B/2$ éléments et est numériquement discrétisé et tronqué à la valeur maximale :

$$k_{\max} = \sqrt{\frac{2m^* E_B}{\hbar^2}} \quad (\text{III.3})$$

où E_B est l'énergie cinétique maximale des états de base. Chaque valeur de k_{ix} (k_{iy}) est contenue dans l'intervalle $[-k_{\max}; k_{\max}]$ et est incrémentée d'un pas numérique de $\Delta k_x = \frac{2\pi}{L_x}$ ($\Delta k_y = \frac{2\pi}{L_y}$). Dans notre formulation, le paramètre E_B limite donc la dimension de l'espace de Hilbert à une valeur de $N_B \times N_B$ en fixant la dimension de l'espace des moments \vec{k} . Ainsi, suivant chaque direction x et y , il y a respectivement $\frac{k_{\max} L_x}{\pi}$ et $\frac{k_{\max} L_y}{\pi}$ valeurs de k_{ix} et k_{iy} . La dimension de l'espace de Hilbert total (à deux sous-bandes) est alors tronquée à $N_B \times N_B$ où :

$$N_B = \frac{2k_{\max}^2 S}{\pi^2} \quad (\text{III.4})$$

Le facteur 2 correspond au nombre de sous-bandes considérées.

Afin que les couplages inter-sousbande soient quantitativement pris en compte dans la diagonalisation de H , il est nécessaire d'étendre la base à une valeur $E_B > E_2 - E_1$, en particulier celle de la sous-bande inférieure. Ainsi, la dispersion de la sous-bande 1 s'étend sur l'intervalle $[E_1; E_1 + E_B]$ et celle de la sous-bande 2 sur l'intervalle $[E_2; E_2 + E_B]$. Le domaine d'énergie $\varepsilon \in [E_2; E_1 + E_B]$ est alors l'intervalle sur lequel un mélange par le désordre des états $n = 1$ et $n' = 2$ est attendu. Pour la structure considérée ici, l'énergie E_B est fixée à 100 meV. Cette valeur couvre largement la séparation inter-sousbande $E_2 - E_1$ de la structure et conduit à une dimension de l'espace de Hilbert de $N_B = 1392$ états. Notons en effet que plus la valeur de E_B est grande plus l'espace des moments est étendu, ce qui est nécessaire à une bonne résolution des fonctions d'onde numériques. En revanche, en contrôlant la dimension de l'espace de Hilbert, E_B contrôle également le temps de calcul : une grande valeur de E_B peut augmenter significativement le temps nécessaire pour le calcul du spectre d'absorption par exemple, pour lequel il nous faut sommer sur tous les états finaux et initiaux possibles de la transition optique. La figure III.1 présente les dispersions numériques de chaque sous-bande (sous-bande 1 en bleu et

sous-bande 2 en rouge). Chaque dispersion contient $N_B/2$ états et s'étend en énergie de E_n à $E_n + E_B$.

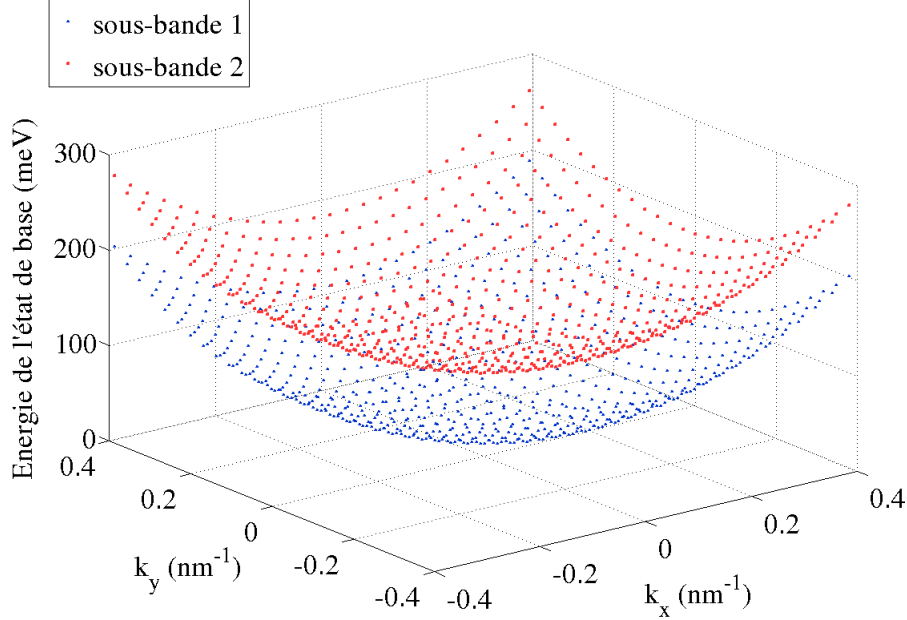


FIGURE III.1 – Dispersion des états de la base numérique $\{|n\vec{k}_i\rangle\}$ à deux sous-bandes. La sous-bande 1 (bleu) a son minimum d'énergie à $E_1 = 33.67$ meV et la sous-bande 2 (rouge) à l'énergie $E_2 = 107.47$ meV. Chaque dispersion contient $N_B/2$ états de base. L'espace de Hilbert total a une dimension $N_B \times N_B$ où $N_B = 1392$. Structure 9/2/3 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75}. $E_2 - E_1 = 73.8$ meV. $E_B = 100$ meV.

Dans cette base numérique, la représentation matricielle du Hamiltonien H correspond à la matrice à blocs suivante :

$$H = \begin{pmatrix} H_{nn} & H_{nn'} \\ H_{n'n} & H_{n'n'} \end{pmatrix} \quad (\text{III.5})$$

où H_{nn} et $H_{n'n'}$ sont les blocs diagonaux contenant exclusivement les termes intra-sousbande à n et n' respectivement et où $H_{nn'}$ et $H_{n'n}$ sont les blocs hors diagonaux contenant les couplages inter-sousbande. Ceux-ci valent respectivement :

$$\begin{aligned} H_{n,n} &= H_0^{nn} + V_{\text{dis}}^{nn} \\ &= \begin{pmatrix} E_n + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m^*} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & E_n + \frac{\hbar^2 k_{N_B/2}^2}{2m^*} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_{\text{dis}}^{nn}(\vec{k}_1, \vec{k}_1) & \cdots & V_{\text{dis}}^{nn}(\vec{k}_1, \vec{k}_{N_B/2}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{\text{dis}}^{nn}(\vec{k}_{N_B/2}, \vec{k}_1) & \cdots & V_{\text{dis}}^{nn}(\vec{k}_{N_B/2}, \vec{k}_{N_B/2}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{III.6})$$

$$\begin{aligned}
 H_{n',n'} &= H_0^{n'n'} + V_{\text{dis}}^{n'n'} \\
 &= \begin{pmatrix} E_{n'} + \frac{\hbar^2 k_{N_B/2+1}^2}{2m^*} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & E_{n'} + \frac{\hbar^2 k_{N_B}^2}{2m^*} \end{pmatrix} \\
 &+ \begin{pmatrix} V_{\text{dis}}^{n'n'}(\vec{k}_{N_B/2+1}, \vec{k}_{N_B/2+1}) & \cdots & V_{\text{dis}}^{n'n'}(\vec{k}_{N_B/2+1}, \vec{k}_{N_B}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{\text{dis}}^{n'n'}(\vec{k}_{N_B}, \vec{k}_{N_B/2+1}) & \cdots & V_{\text{dis}}^{n'n'}(\vec{k}_{N_B}, \vec{k}_{N_B}) \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{III.7}$$

ainsi que :

$$H_{nn'} = \begin{pmatrix} V_{\text{dis}}^{nn'}(\vec{k}_1, \vec{k}_{N_B/2+1}) & \cdots & V_{\text{dis}}^{nn'}(\vec{k}_1, \vec{k}_{N_B}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{\text{dis}}^{nn'}(\vec{k}_{N_B/2}, \vec{k}_{N_B/2+1}) & \cdots & V_{\text{dis}}^{nn'}(\vec{k}_{N_B/2}, \vec{k}_{N_B}) \end{pmatrix} \tag{III.8}$$

et :

$$H_{n'n} = \begin{pmatrix} V_{\text{dis}}^{n'n}(\vec{k}_{N_B/2+1}, \vec{k}_1) & \cdots & V_{\text{dis}}^{n'n}(\vec{k}_{N_B/2+1}, \vec{k}_{N_B/2+1}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{\text{dis}}^{n'n}(\vec{k}_{N_B}, \vec{k}_1) & \cdots & V_{\text{dis}}^{n'n}(\vec{k}_{N_B}, \vec{k}_{N_B/2}) \end{pmatrix} \tag{III.9}$$

où $V_{\text{dis}}^{nn'}(\vec{k}_i, \vec{k}_{i'}) = \langle n\vec{k}_i | V_{\text{dis}} | n'\vec{k}_{i'} \rangle$. Les dispersions des sous-bandes n et n' ont une discrétisation numérique identique, d'où $k_{N_B/2+1} = k_1$ et $k_{N_B} = k_{N_B/2}$. De plus $V_{\text{dis}}^{nn'} = (V_{\text{dis}}^{n'n})^*$, ce qui vérifie bien la propriété d'hermiticité du Hamiltonien H . Dans la suite, nous noterons les éléments de matrice de désordre intra-sousbande $V_{\text{dis}}^{nn} = V_{\text{dis}}^{\text{intra}}$ et les éléments de matrice inter-sousbande $V_{\text{dis}}^{nn'} = V_{\text{dis}}^{\text{inter}}$ (ou $V_{\text{dis}}^{n'n}$).

Les états électroniques de la structure désordonnée sont les états propres du Hamiltonien H . La fonction d'onde de chaque état propre $|\nu\rangle$ d'énergie ε_ν peut être écrite sous la forme :

$$\langle \vec{r} | \nu \rangle = \Psi_\nu(\vec{r}) = \sum_n \varphi_{n\nu}(\vec{\rho}) \chi_n(z) \tag{III.10}$$

où $\nu = 1, 2, \dots, N_B$ est l'indice de l'état propre et où $\varphi_{n\nu}$ est la décomposition en onde plane :

$$\varphi_{n\nu}(\vec{\rho}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_i c_{n\nu}(\vec{k}_i) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{\rho}} \tag{III.11}$$

Les coefficients complexes $c_{n\nu}$ sont les données pertinentes du problème puisqu'ils contiennent les effets du désordre sur les états de conduction de la structure. Pour les déterminer, notre approche consiste à calculer dans un premier temps les composantes z des états électroniques ($\chi_n(z)$ et E_n) par la résolution numérique de l'équation de Schrödinger à une dimension le long de l'axe z (Eq. I.5), puis dans un second temps à résoudre l'équation de Schrödinger dans le plan (x, y) par diagonalisation numérique de H . Cette dernière étape correspond à la résolution de l'équation aux valeurs propres suivante :

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \varphi_{\nu,n}(\vec{\rho}) + \sum_{n'} \varphi_{\nu,n'}(\vec{\rho}) V_{\text{dis}}^{nn'}(\vec{\rho}) = (\varepsilon_\nu - E_n) \varphi_{\nu,n}(\vec{\rho}) \tag{III.12}$$

dont les énergies ε_ν sont les valeurs propres et dont les coefficients $c_{n\nu}$ inclus dans (III.11) sont les vecteurs propres normalisés ($\sum_i |c_{n\nu}(\vec{k}_i)|^2 = 1$).

Cette approche numérique nous donne accès au spectre des énergies du système désordonné ainsi qu'aux fonctions d'onde électroniques perturbées par le désordre. Le spectre des énergies comprend un ensemble d'états discrets initialement associés aux sous-bandes 1 et 2. A l'issue de la diagonalisation de H , il n'est plus possible de faire cette distinction d'appartenance à une sous-bande donnée, en particulier sur l'intervalle de mélange $\varepsilon_\nu \in [E_2 ; E_1 + E_B]$. Par ailleurs, le désordre étant ici traité à tous les ordres, des effets non accessibles par les méthodes perturbatives conventionnelles sont désormais observables tels que l'existence d'états liés ou quasi-liés dont l'énergie se retrouve inférieure au minimum de sous-bande $E_{1,2}$. La nature et les propriétés de ces états particuliers seront largement étudiées au cours des sections qui suivent.

Rappelons enfin qu'en absence de désordre, notre formulation tend vers les limites suivantes :

$$\nu \rightarrow (n, \vec{k}) \quad (\text{III.13})$$

$$\varphi_{\nu,n}(\vec{\rho}) \rightarrow \exp(i\vec{k} \cdot \vec{\rho}) \quad (\text{III.14})$$

$$\varepsilon_\nu \rightarrow E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (\text{III.15})$$

pour lesquelles les composantes suivant x et y des états numériques tendent vers des états d'onde plane de même énergie.

Dans le cadre de notre étude détaillée de l'absorption dans les structures à cascade quantique, l'intérêt d'une telle diagonalisation réside aussi et surtout dans le calcul du spectre d'absorption inter-sousbande du système à tous les ordres du potentiel de désordre, et ainsi dans une description exacte de la forme et de la largeur de raie. L'élément de matrice du couplage dipolaire entre deux états numériques est proportionnel à :

$$(p_z)_{\nu\mu} = \langle \Psi_\nu | p_z | \Psi_\mu \rangle \quad (\text{III.16})$$

Par analogie aux calculs du coefficient d'absorption effectués au chapitre II, en présence d'une onde lumineuse incidente à la fréquence angulaire ω , celui-ci se définit ici par [40, 98] :

$$\alpha(\omega) = \frac{2\pi e^2}{m^{*2}\omega\varepsilon_0 c n_r L_z S} \sum_{\nu,\mu} (f_\nu - f_\mu) |\langle \Psi_\nu | p_z | \Psi_\mu \rangle|^2 \delta(\varepsilon_\mu - \varepsilon_\nu - \hbar\omega) \quad (\text{III.17})$$

où f_ν et f_μ sont les fonctions d'occupation respectives des états $|\nu\rangle$ et $|\mu\rangle$. Nous considérons les distributions de Fermi-Dirac :

$$f_\nu = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_\nu - \mu_c)}} \quad (\text{III.18})$$

La détermination des fonctions $f_{\nu,\mu}$ nécessite de connaître le potentiel chimique μ_c . Or dans cette approche numérique, celui-ci ne peut être déterminé analytiquement comme c'était le cas au chapitre II. Le calcul de ce paramètre doit nécessairement

passer par une résolution numérique. A partir de l'expression (III.18), nous résolvons par dichotomie numérique l'équation suivante :

$$2 \sum_{\nu} \frac{1}{1 + X e^{\beta \varepsilon_{\nu}}} - n_e S = 0 \quad (\text{III.19})$$

où $X = e^{-\beta \mu_c}$ et où le facteur 2 tient compte de la somme sur les états de spin $\pm 1/2$. Le potentiel chimique μ_c de la distribution des états ε_{ν} à une température électronique T donnée vaut alors :

$$\mu_c = -k_B T \ln X \quad (\text{III.20})$$

La figure III.2 présente l'évolution de μ_c en fonction de la température T pour la structure décrite précédemment et en présence de désordre d'interface. Le potentiel chimique est évalué en résolvant l'équation (III.19) en considérant d'une part des distributions de Fermi-Dirac et d'autre part des distributions de Boltzmann. Comme nous l'avions déjà observé sur la figure II.5 et pour la faible densité de porteurs considérée, les deux descriptions s'accordent bien à haute température mais en-dessous de $T = 70$ K, un écart significatif apparait et seules les distributions de Fermi-Dirac apportent une description des populations électroniques satisfaisante.

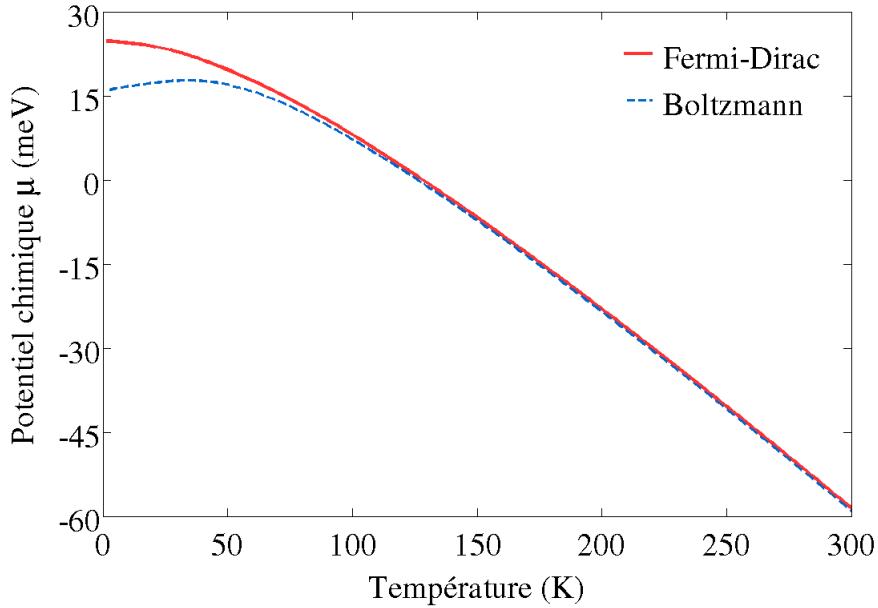


FIGURE III.2 – Evolution du potentiel chimique μ_c en fonction de la température électronique T . μ_c est déterminé numériquement en considérant des distributions de Fermi-Dirac (continu rouge) ou des distributions de Boltzmann (pointillé bleu) en présence de désordre d'interface. Structure 9/2/3 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75}. $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $\sigma = 3.6 \text{ nm}$, $h_{def} = 2.83 \text{ \AA}$ et $f_{def} = 0.30$. $N_{att} = N_{rep} = N_{def}/2$.

Par ailleurs, la fonction δ traduisant la conservation de l'énergie au cours du processus d'absorption dans (III.17) est remplacée par une fonction de convolution gaussienne normalisée, de largeur à mi-hauteur σ_G . Cette largeur est typiquement de l'ordre de l'écart moyen en énergie entre deux valeurs propres consécutives ($\sigma_G \sim 10^{-1} \text{ meV}$) :

$$\delta(\varepsilon_{\mu} - \varepsilon_{\nu} - \hbar\omega) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_G^2}} e^{-(\varepsilon_{\mu} - \varepsilon_{\nu} - \hbar\omega)^2 / (2\sigma_G^2)} \quad (\text{III.21})$$

Dans la suite, nous nous intéressons à l'effet du désordre sur l'élément de matrice $(p_z)_{\nu\mu}$, en particulier sur l'élargissement de la raie d'absorption ainsi que sur la nature des transitions optiques entre les états perturbés pour lesquels l'invariance par translation est désormais brisée. Mais il est intéressant de commencer cette étude par une analyse détaillée du spectre d'énergie et de la nature des états du système désordonné.

III.3 Spectre d'énergie et états liés

Rappelons que dans les structures à multi-puits quantiques couplés, le mouvement des porteurs suivant z peut être découplé de leur mouvement dans le plan (x, y) (voir section I.3). Tandis que les composantes des états propres de la structure présentent un fort confinement le long de l'axe de croissance, les composantes dans le plan des couches sont délocalisées et traduisent du mouvement libre des porteurs résultant de l'invariance par translation. Le spectre des énergies propres d'une structure idéale est quant à lui discrétisé en niveaux de sous-bande à dispersion parabolique (si les effets de non-parabolicité sont négligés). L'introduction du désordre statique brise l'invariance par translation et modifie profondément la nature des états de conduction. Du point de vue de l'électron, le plan (x, y) n'est plus un plan infini idéal mais est désormais une surface sur laquelle des centres diffuseurs perturbent significativement son mouvement.

Par ailleurs, les potentiels de désordre de type attractif tels que ceux générés par une distribution d'impuretés ionisées ou encore par les défauts d'interface attractifs, ont la particularité de lier des états [110]. Ces états liés ou quasi-liés² sont des états discrets dont l'énergie est inférieure au minimum de sous-bande et émergent de couplages à diffusions multiples [111]. L'existence de tels états ne peut donc pas être prédite par des approches perturbatives conventionnelles, en particulier celles qui reposent sur l'approximation de Born où seuls les termes quadratiques de couplage sont pris en compte. Par contre, la diagonalisation exacte du Hamiltonien H exposée en section III.2 donne accès à la nature réelle des états électroniques perturbés.

La figure III.3 représente la densité d'états de la structure de double puits quantique décrite en section III.3, en présence des défauts d'interface. Les états propres associés aux sous-bandes 1 (graphe a) et 2 (graphe b) sont calculés par diagonalisation numérique du Hamiltonien H réduit à chaque sous-bande. Cette réduction de H aux sous-espaces de chaque sous-bande nous permet en particulier de distinguer de quelle sous-bande les états propres sont initialement issus et s'avère très utile à la compréhension du spectre des énergies du système. Mais comme nous l'évoquons en section III.2, les calculs de spectre d'absorption qui suivent nécessitent la prise en compte des termes de mélange d'états inter-sousbande et par conséquent, le développement de H à deux sous-bandes. La densité des états propres $\varepsilon_{n\nu}$ ($n = 1, 2$) ainsi obtenue est déterminée en fonction de l'énergie ε à partir de l'expression :

$$D(\varepsilon) \propto \sum_{\nu} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n\nu}) \quad (\text{III.22})$$

2. Contrairement aux états liés de la sous-bande fondamentale, ceux des sous-bandes excitées seront qualifiés d'état "quasi-liés" car ils ont des énergies comparables à celles des états du continuum de la (des) sous-bande(s) inférieure(s).

où encore une fois, pour être traitée numériquement, la fonction δ a été remplacée par une fonction gaussienne comme dans de l'expression (III.21). Ce calcul a été répété pour 50 configurations aléatoires de désordre d'interface et pour trois fractions de recouvrement f_{def} différentes (correspondant à trois nombres de défauts N_{def} différents). Les minima respectifs des sous-bandes 1 et 2 sont repérés par les lignes en pointillé. Rappelons que la densité d'états de la structure en absence de défaut serait :

$$D(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{m^* S}{\pi \hbar^2} & \text{si } \varepsilon \geq E_n ; \\ 0 & \text{si } \varepsilon < E_n . \end{cases} \quad (\text{III.23})$$

Or, en présence du désordre, nous distinguons très nettement sur les graphes de la figure III.3 des contributions aux énergies $\varepsilon < E_n$, signatures de l'existence d'états liés. Il est alors utile de définir l'énergie de liaison, notée E_{lias} , de ces états :

$$E_{\text{lias}}(\nu) = E_n - \varepsilon_{n\nu} \quad (\text{III.24})$$

et de noter que celle-ci dépend en principe de la force du potentiel de désordre. Les états quasi-liés de la sous-bande 2 présentent des énergies de liaison supérieures à celles des états liés de la sous-bande 1 car la fonction enveloppe χ_2 pénètre davantage dans les barrières de la structure que χ_1 . La densité de probabilité $|\chi_2|^2$ étant supérieure à $|\chi_1|^2$ aux interfaces, l'effet du désordre est donc plus important en sous-bande 2.

Notons également que le nombre de défauts présents dans la structure ne modifie que très légèrement cette énergie de liaison. Une légère augmentation de E_{lias} pour $N_{\text{def}} = 230$ se distingue néanmoins sur le graphe III.3.b mais l'effet reste très faible. Le potentiel de désordre d'interface possède en effet deux contributions, l'une attractive et l'autre répulsive. Ceci est donc du à la présence des défauts répulsifs et à l'augmentation simultanée de leur nombre à travers le paramètre N_{def} . Cet autre type de défaut crée un effet inverse sur les énergies propres : les défauts répulsifs ne lient pas les états, au contraire ils décalent leur énergie vers le bleu.

Par analogie à la figure III.3, la figure III.4 montre la densité des états propres de la structure pour laquelle un plan de dopage a été introduit dans le puits le plus large ($z_l = 3$ nm), les donneurs sont dans ce cas les seuls diffuseurs du système. Cette fois-ci, une nette augmentation de E_{lias} se produit à mesure que le nombre d'impuretés N_{imp} augmente. Rappelons en effet que le potentiel de diffusion total résulte de la somme des potentiels coulombiens créés par chaque impureté (Eqs. I.13 et I.14). Considérer un nombre croissant d'impuretés revient, entre autres, à augmenter leur efficacité à lier les états et tend donc à augmenter E_{lias} (voir figure III.4). Notons également une différence entre les énergies de liaison des deux sous-bandes : pour cette position donnée du plan de dopage, c'est la sous-bande 1 qui est la plus affectée et présente donc des états liés plus profonds. En section III.5.2, une étude détaillée de l'influence de la position du plan de dopage sur la largeur et la forme de la raie d'absorption inter-sousbande de la structure sera exposée.

Remarquons enfin que cet effet de piégeage des états est d'autant plus marqué pour les donneurs que pour les défauts. Outre le fait que les impuretés ionisées donatrices créent des puits de potentiels purement attractifs contrairement aux défauts d'interface, ces derniers sont des diffuseurs de courte portée et de faible efficacité.

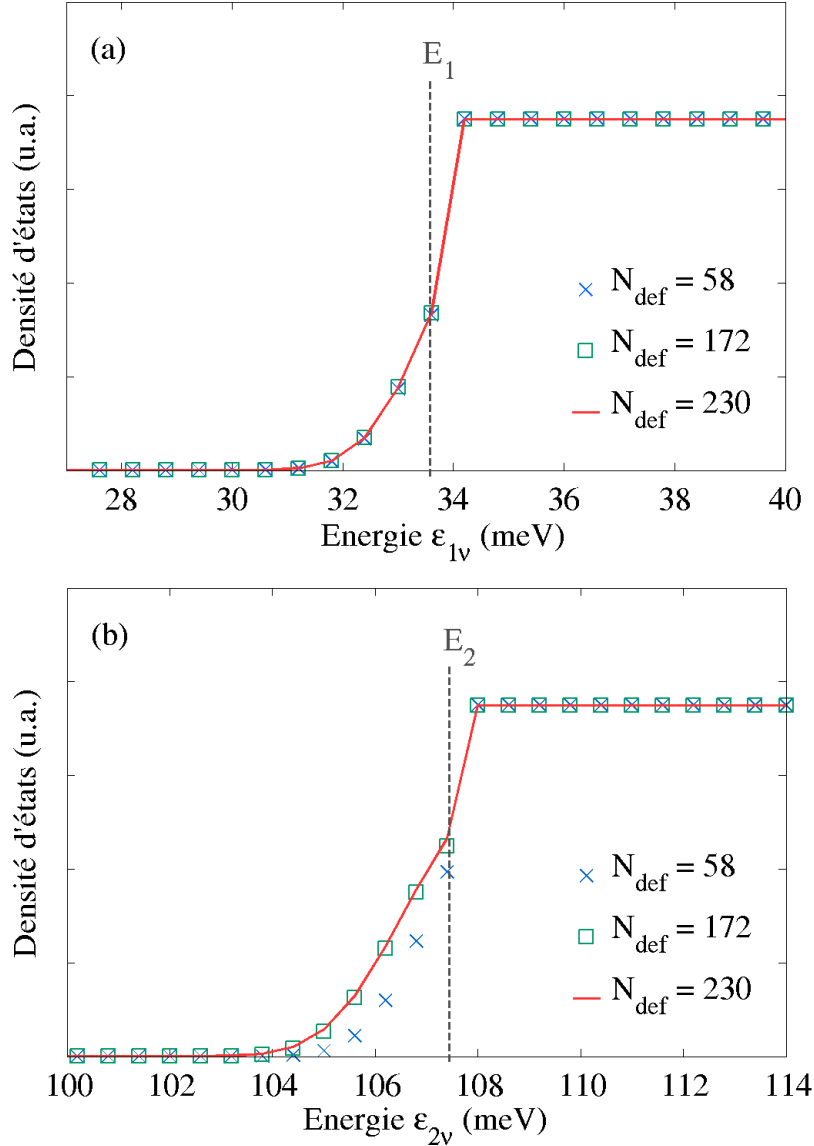


FIGURE III.3 – Densités d'états des valeurs propres du Hamiltonien H associées à la sous-bande 1 (a) et à la sous-bande 2 (b). Le terme de désordre V_{dis} dans H correspond au potentiel de désordre d'interface caractérisé par les paramètres $h_{\text{def}} = 2.83$ Å et $\sigma = 3.6$ nm et pour trois fractions de recouvrement de défauts correspondant à un nombre de défauts $N_{\text{def}} = 58$ (croix bleues), $N_{\text{def}} = 172$ (carrés verts) et $N_{\text{def}} = 230$ (trait continu rouge). $N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = N_{\text{def}}/2$. $E_1 = 33.67$ meV et $E_2 = 107.46$ meV. Moyenne effectuée sur 50 configurations aléatoires de défauts d'interface.

Ceux-ci génèrent donc des états liés peu profonds en comparaison.

Une autre particularité intéressante des états liés et quasi-liés est leur nature d'état spatialement localisé. La figure III.5 illustre ces effets de localisation en présentant la densité de probabilité des états exacts φ_{nv} dans le plan (x, y) pour quatre états propres de H en présence des défauts d'interface. Il s'agit ici d'états propres associés initialement à la sous-bande 2 pour laquelle l'effet du désordre d'interface est le plus efficace. Les courbes présentées sont obtenues par diagonalisation de H pour une seule configuration de désordre donnée. Aux basses énergies (graphe a et b), les

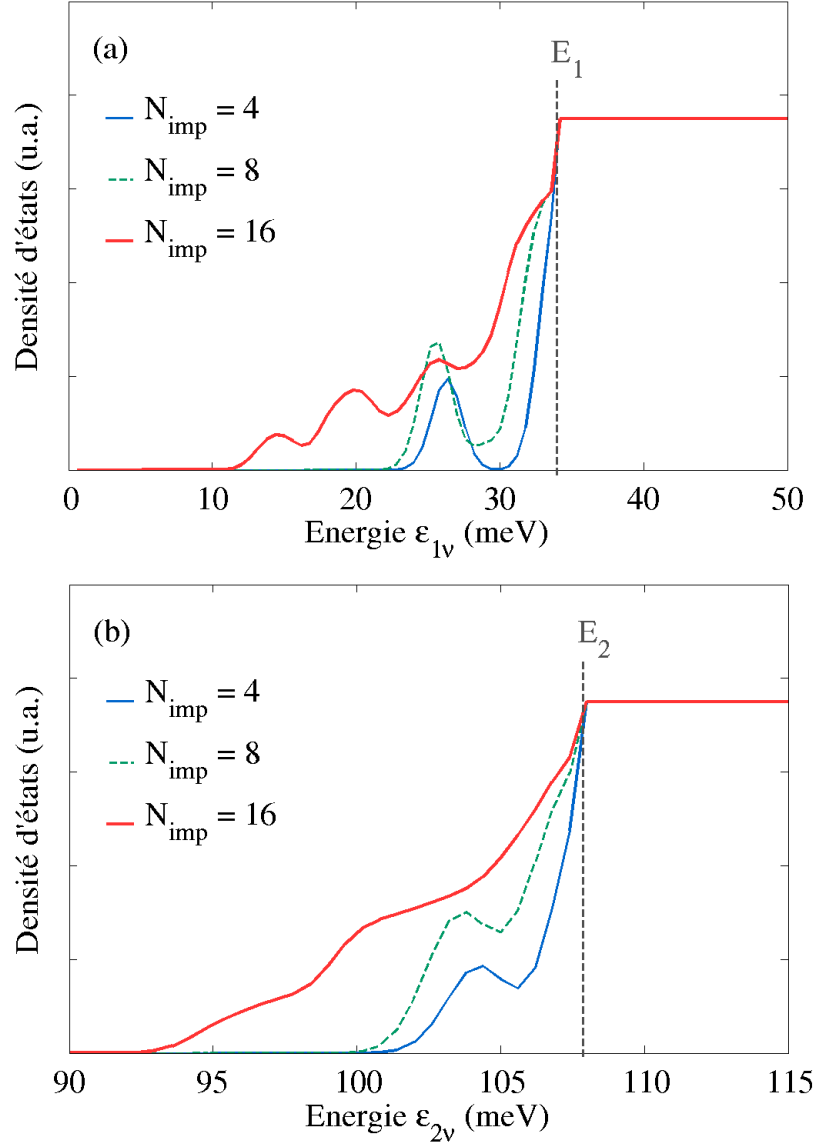


FIGURE III.4 – Densités d'états des valeurs propres du Hamiltonien H associées à la sous-bande 1 (a) et à la sous-bande 2 (b). Le terme de désordre V_{dis} dans H correspond au potentiel coulombien attractif écranté créé par la distribution de N_{imp} impuretés ionisées placées sur le plan $z_l = 3$ nm et pour trois concentrations d'impuretés différentes : $N_{\text{imp}} = 4$ (continu bleu), $N_{\text{imp}} = 8$ (pointillé vert) et $N_{\text{imp}} = 16$ (continu rouge). $E_1 = 33.67$ meV et $E_2 = 107.46$ meV. Moyenne effectuée sur 50 configurations aléatoires d'impuretés ionisées.

fonctions d'onde présentent une forte localisation autour des centres de diffusion attractifs et ont une allure radicalement différente de celle des fonctions d'onde plane idéales d'électron libre. Ces effets deviennent néanmoins moins prononcés à mesure que l'énergie de l'état augmente (graphe c et d), une délocalisation spatiale croissante avec l'énergie de l'état se profile. Pour des énergies typiquement supérieures aux fluctuations du potentiel de désordre, l'effet de ce dernier devient effectivement négligeable et la limite d'onde plane des expressions (III.13) à (III.15) est atteinte.

Cette tendance est confirmée par la figure III.6 qui représente l'écart-type moyen

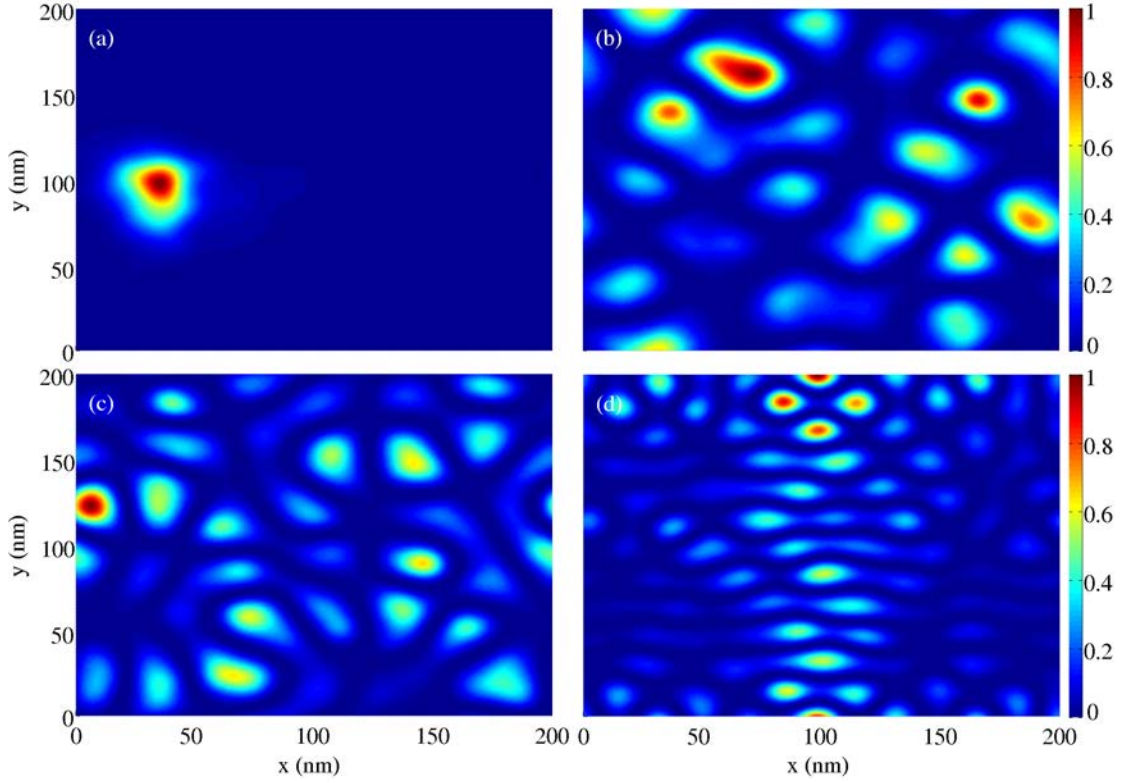


FIGURE III.5 – Densité de probabilité électronique normalisée pour différentes énergies propres du Hamiltonien H associées à la sous-bande 2. Le terme de désordre V_{dis} correspond au potentiel de désordre d'interface caractérisé par les paramètres $f_{\text{def}} = 0.3$, $h_{\text{def}} = 2.83 \text{ \AA}$ et $\sigma = 3.6 \text{ nm}$. $N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = N_{\text{def}}/2$. Les énergies sont : (a) $E = E_2 - 1.3 \text{ meV}$ (plus profond état lié), (b) $E = E_2 + 5 \text{ meV}$, (c) $E = E_2 + 10 \text{ meV}$ et (d) $E = E_2 + 20 \text{ meV}$.

σ_x de la position x des états propres $|\nu\rangle$ en fonction de leur énergie :

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (\text{III.25})$$

avec $\langle x^2 \rangle = \langle \nu | x^2 | \nu \rangle$ et $\langle x \rangle = \langle \nu | x | \nu \rangle$. Les états $|\nu\rangle$ sont les états propres de H (à deux sous-bandes) en présence des défauts d'interface et les points obtenus sont le résultat de 50 configurations aléatoires de désordre différentes. Les écart-types se répartissent majoritairement autour de la valeur moyenne $\bar{\sigma}_x \approx 58 \text{ nm}$. Cette valeur correspond à l'écart-type moyen d'un état d'onde plane idéal dans la boîte de dimension $L_x \times L_y$ ($L_x = L_y = 200 \text{ nm}$). Cette répartition traduit de nouveau le fait que suffisamment loin des minima de sous-bande (typiquement $E_n + E_{\text{lias}}$), les états propres retrouvent une délocalisation d'onde plane idéale et restent peu affectés par le désordre. En revanche, les états proches voire en-dessous des minima E_n (états liés et quasi-liés) présentent un écart-type qui s'éloigne de cette valeur $\bar{\sigma}_x$. Notons d'ailleurs une déviation très importante pour les états principalement issus de E_2 par rapport à ceux issus de E_1 reflétant encore une fois le fait que la sous-bande 2 est plus affectée par le désordre d'interface. La répartition des états en bandes verticales résulte quant à elle de la quantification numérique de l'espace de vecteurs \vec{k} . Il s'agit d'un artéfact numérique inévitable dès lors qu'un nombre fini de vecteurs de base est considéré. Ce graphe confirme bien la nature fortement localisée des états liés et quasi-liés observée sur la figure III.5.

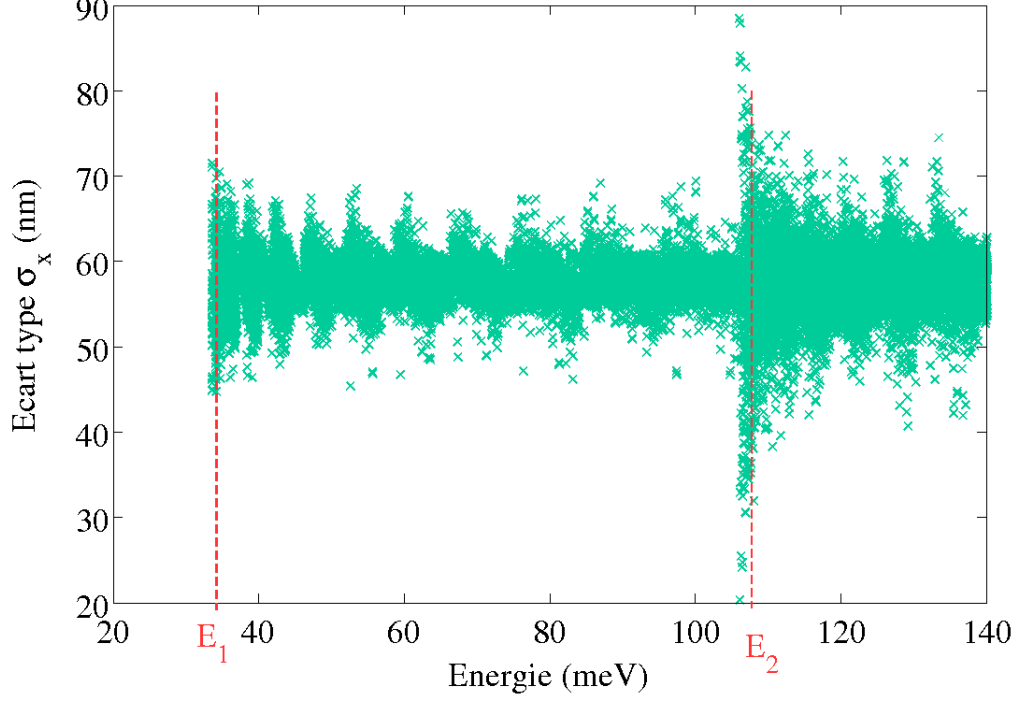


FIGURE III.6 – Ecart-type σ_x des états propres du Hamiltonien H en fonction de leur énergie, en présence de défauts d'interface. $E_1 = 33.67$ meV et $E_2 = 107.46$ meV. $\sigma = 3.6$ nm, $f_{\text{def}} = 0.30$ et $h_{\text{def}} = 2.83$ Å. $N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = N_{\text{def}}/2$. Moyenne effectuée sur 50 configurations aléatoires de défauts.

La présence d'états liés et quasi-liés dans le spectre d'énergie du système ainsi que leur localisation spatiale sont deux caractéristiques qu'il est impératif de prendre en compte pour une bonne description de la largeur de raie d'absorption, en particulier aux basses températures pour lesquelles la contribution statistique de ces états domine. Dans la suite de ce chapitre, nous nous intéressons à leur contribution au spectre d'absorption. De plus, le chapitre IV sera consacré à une étude de leur influence sur les taux de diffusion inter-sousbande.

III.4 Absorption en présence de défauts d'interface

La rugosité d'interface est une source de diffusion intrinsèque à l'hétérostructure car elle résulte du contrôle non-optimal des interfaces entre les différentes couches de croissance [112, 113]. Dans cette section, nous nous intéressons à l'élargissement de la raie d'absorption inter-sousbande $n = 1 \rightarrow n' = 2$ dû au désordre d'interface. A partir des états propres du système obtenus par diagonalisation numérique de H , nous calculons le spectre d'absorption. Le Hamiltonien H est développé dans la base à deux sous-bandes $\{|n\vec{k}_i\rangle\}$ décrite en section III.2 afin de tenir compte du mélange inter-sousbande des états.

En présence des défauts d'interface, le terme V_{dis} dans H est remplacé par le potentiel V_{def} introduit au chapitre I. Pour une configuration aléatoire donnée de

désordre, le calcul des éléments de matrice de V_{def} conduit à :

$$V_{\text{def}}^{nn'}(\vec{k}_i, \vec{k}_{i'}) = \frac{2\pi e^2 V_b}{S} e^{-iq_{ii'}^2 \sigma^2 / 2} \times \sum_{z_0} \left[\sum_{j=1}^{N_{\text{rep}}} e^{i\vec{q}_{ii'} \cdot \vec{\rho}_j} \tilde{u}_{nn'}^{\text{rep}}(z_0) - \sum_{j=1}^{N_{\text{att}}} e^{i\vec{q}_{ii'} \cdot \vec{\rho}_j} \tilde{u}_{nn'}^{\text{att}}(z_0) \right] \quad (\text{III.26})$$

où $\vec{q}_{ii'} = \vec{k}_i - \vec{k}_{i'}$ est la différence de vecteur d'onde entre les deux états de base impliqués dans le couplage au désordre. Comme aux chapitres précédents, l'entier j indice les positions aléatoires $\vec{\rho}_j$ des défauts à l'interface z_0 . Le premier terme de la somme sur z_0 correspond à la contribution des défauts répulsifs tandis que le second à celle des défauts attractifs. Les défauts sont introduits aux deux interfaces internes de la structure du double puits quantique. Les intégrales $\tilde{u}_{nn'}^{\text{rep}}$ et $\tilde{u}_{nn'}^{\text{att}}$ quant à elles ont des expressions similaires aux expressions (II.19) et (II.20) et valent explicitement ici :

$$\tilde{u}_{nn'}^{\text{rep}}(z_0) = \int_{z_0 - h_{\text{def}}}^{z_0} dz \chi_n(z) \chi_{n'}(z) \quad (\text{III.27})$$

$$\tilde{u}_{nn'}^{\text{att}}(z_0) = \int_{z_0}^{z_0 + h_{\text{def}}} dz \chi_n(z) \chi_{n'}(z) \quad (\text{III.28})$$

Le coefficient d'absorption est alors calculé en fonction de l'énergie du photon incident $\hbar\omega$ à partir de l'expression (III.17) et les spectres présentés dans la suite sont moyennés sur 50 configurations aléatoires de désordre (soit 50 tirages de coordonnées aléatoires $\vec{\rho}_j$).

III.4.1 Comparaison : approche perturbative et diagonalisation exacte

Au chapitre précédent, nous avons calculé le coefficient d'absorption α_{def} en suivant notre approche perturbative au premier ordre en V_{def} pour l'absorption par porteurs libres. Nous avons souligné les limites de ce modèle analytique, notamment pour la description du spectre d'absorption au voisinage de la résonance. Mais dans les LCQ, l'énergie du photon n'étant résonante avec aucune autre énergie de séparation inter-sousbande, les pertes par porteurs libres correspondent aux ailes du spectre d'absorption *a priori* bien décrites par notre approche perturbative. Nous pouvons désormais utiliser notre approche numérique exacte pour vérifier ces conclusions et comparer ce calcul perturbatif au résultat numérique.

La figure III.7 présente le spectre d'absorption de la structure calculé suivant nos deux différentes approches. Cette comparaison est faite pour trois températures électroniques $T = 5, 100$ et 300 K. D'après les résultats des figures II.5 et III.2 de l'étude des différentes statistiques des porteurs, le spectre d'absorption obtenu par développement perturbatif à la température de 5 K nécessite d'être calculé à partir des distributions de Fermi-Dirac. Les graphes de la figure III.7 ont donc été évalués en remplaçant les fonctions d'occupation de Boltzmann par des distributions de Fermi-Dirac dans l'expression (II.23).

Ces trois graphes présentent un excellent accord quantitatif entre les deux modèles : sur les deux ailes d'absorption, les deux courbes convergent vers les mêmes

valeurs de perte par porteurs libres. Par ailleurs, comme attendu, l'absorption à la résonance présente une divergence pour le modèle perturbatif tandis que le calcul numérique, où tous les termes de la série de perturbation sont implicitement sommés, donne un pic d'amplitude finie. La forme de raie est également bien reproduite, en particulier son asymétrie qui est par ailleurs accentuée à basse température. Cette asymétrie est due au fait que les électrons occupent principalement les états de basses énergies pour les basses températures. Ainsi, seuls les états d'énergie suffisamment élevée sont libres et disponibles comme états finaux d'une transition optique.

Notons enfin la présence d'oscillations sur le spectre d'absorption du calcul numérique. Cells-ci sont, elles aussi, accentuées à basse température et proviennent de la contribution statistique des états liés et quasi-liés. A basse température, ces états fortement discrétisés et localisés dominent les termes d'occupation et les transitions qui les relient contribuent majoritairement au spectre d'absorption. Au contraire, à plus haute température, les états du continuum sont davantage peuplés et la contribution relative des états liés et quasi-liés diminue dans le bilan des populations. Ceci entraîne une atténuation des oscillations sur les ailes du spectre d'absorption à mesure que T augmente.

III.4.2 Différentes contributions au spectre d'absorption

La comparaison exposée à la section précédente de nos deux modèles de calcul du spectre d'absorption rend bien compte de la validité de notre approche perturbative pour l'estimation des pertes par porteurs libres. Rappelons que dans notre formulation, l'absorption du photon hors résonance est assistée par les diffusions intra- et inter-sousbande et nécessite un couplage à un état virtuel [98]. Notre approche exacte nous permet également de sonder ces différents mécanismes mais aussi d'évaluer leur contributions respectives au spectre d'absorption [76].

Nous montrons sur la figure III.8 (graphe de gauche) le spectre d'absorption inter-sousbande de la structure de double puits quantique évalué par diagonalisation numérique (ce spectre est déjà présenté à la figure III.7 pour $T = 100$ K). Ce spectre est comparé à un autre résultat du calcul numérique pour lequel seuls les termes de diffusion intra-sousbande ont été inclus dans H . Autrement dit, nous diagonalisons ici la matrice incluant uniquement les couplages intra-sousbande :

$$H = \begin{pmatrix} H_{nn} & 0 \\ 0 & H_{n'n'} \end{pmatrix} \quad (\text{III.29})$$

Les deux spectres d'absorption présentent un excellent accord quantitatif dans le domaine des hautes énergies et au voisinage de la résonance. Il apparaît donc clairement que la diffusion intra-sousbande contrôle la raie centrale d'absorption et l'aile à haute énergie mais ne décrit absolument pas l'aile des basses énergies.

De manière symétrique, la figure III.9 montre la même comparaison mais cette fois-ci, le second spectre d'absorption a été calculé en introduisant uniquement les termes $V_{\text{def}}^{\text{inter}}$ dans H :

$$H = \begin{pmatrix} H_{nn} & H_{nn'} \\ H_{n'n} & H_{n'n'} \end{pmatrix} \quad (\text{III.30})$$

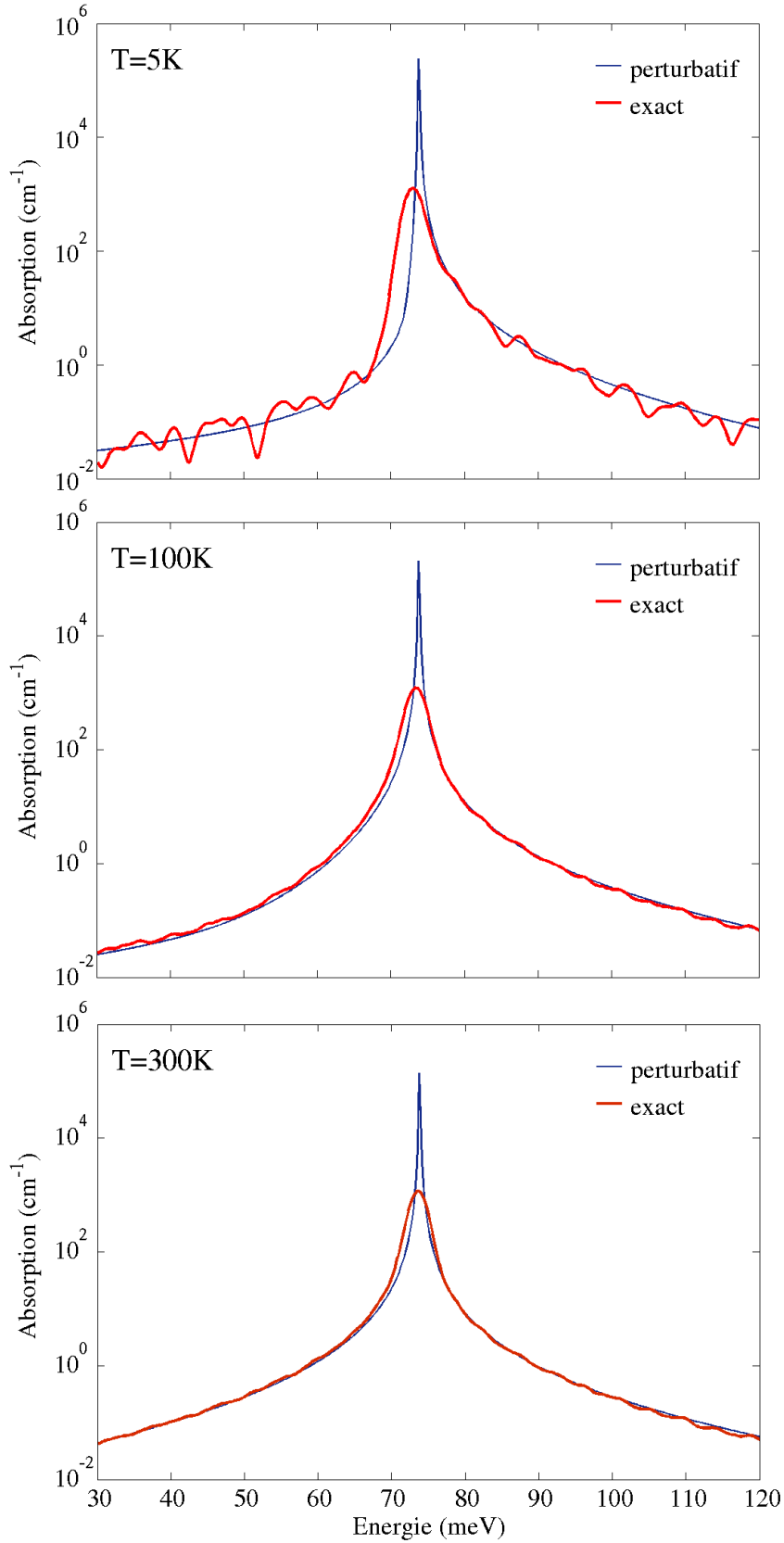


FIGURE III.7 – Comparaison des spectres d'absorption pour la transition $E_1 - E_2$ calculés à partir de l'approche perturbative développée au chapitre II (continu bleu) et de la diagonalisation numérique du Hamiltonien H (continu rouge) pour trois températures : $T = 5$ K, $T = 100$ K et $T = 300$ K, et en présence de désordre d'interface. $f_{\text{def}} = 0.30$, $h_{\text{def}} = 2.83$ Å et $\sigma = 3.6$ nm. $N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = N_{\text{def}}/2$. $n_e = 2.17 \times 10^{10}$ cm $^{-2}$. $E_2 - E_1 = 73.8$ meV. 50 configurations aléatoires de désordre pour le calcul exact.

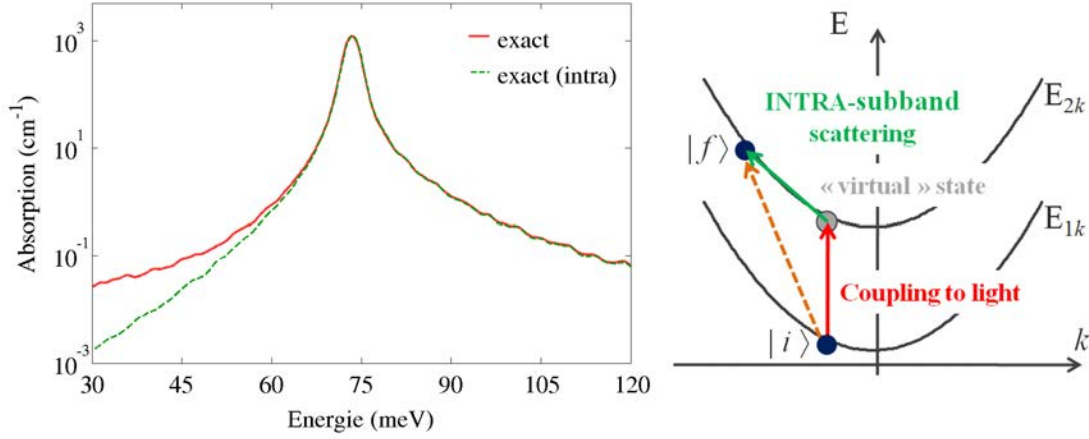


FIGURE III.8 – Graphe de gauche : Spectres d'absorption pour la transition $E_1 - E_2$ calculés par diagonalisation numérique du Hamiltonien H complet (continu rouge) ou en incluant dans H uniquement les termes de couplage intra-sousbande (pointillé vert). Le terme de désordre V_{dis} dans H correspond au potentiel de désordre d'interface caractérisé par les paramètres $f_{\text{def}} = 0.30$, $h_{\text{def}} = 2.83 \text{ \AA}$ et $\sigma = 3.6 \text{ nm}$. $N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = N_{\text{def}}/2$. $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $E_2 - E_1 = 73.8 \text{ meV}$. $T = 100 \text{ K}$. 50 configurations aléatoires de désordre. Schéma de droite : Représentation du mécanisme d'absorption par porteurs libres inter-sousbande $|1\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$ médié par un défaut d'interface. Cette transition oblique implique un couplage électron-défaut intra-sousbande.

où désormais : $H_{nn} = H_0^{nn}$ et $H_{n'n'} = H_0^{n'n'}$ n'incluant donc uniquement les couplages inter-sousbande. Le résultat inverse est obtenu : la diffusion inter-sousbande domine manifestement la partie des basses énergies et joue un rôle négligeable au centre de la résonance et à haute énergie.

Ces résultats sont en réalité en accord avec la formulation développée dans notre approche perturbative. Le schéma de la figure III.9 représente le mécanisme détaillé d'une transition intra-sousbande. L'aile d'absorption des basses énergies est dominée par ces transitions optiques intra-sousbande, transitions qui sont, d'après notre approche perturbative, activées par les diffusions inter-sousbande. Les états initiaux et finaux impliqués dans ce mécanisme d'absorption non résonante sont en effet issus initialement de la même sous-bande. Par conséquent, puisque l'interaction dipolaire active uniquement les couplages inter-sousbande, en partant d'un état initial de la sous-bande 1, un couplage inter-sousbande additionnel est nécessaire pour que la transition oblique intra- E_1 de basse énergie soit effectuée.

Au contraire, l'absorption de haute énergie implique essentiellement des processus E_1 vers E_2 et relie donc principalement des couplages secondaires intra-sousbande. Les transitions optiques inter-sousbande obliques ont majoritairement lieu à des énergies proches ou supérieures à l'énergie de la résonance. L'absorption qui en résulte correspond donc bien à la raie centrale et à l'aile des hautes énergies, comme le montre également le schéma de la figure III.8. L'introduction de ces couplages dans le Hamiltonien H donne alors lieu à l'activation de l'aile de haute énergie du spectre d'absorption.

Il est également intéressant de noter que la raie centrale est correctement reproduite si on se limite à la prise en compte des couplages intra-sousbande uniquement tandis que la prise en compte des couplages inter-sousbande seuls échoue dans la prédiction de son intensité mais aussi de sa forme/ largeur.

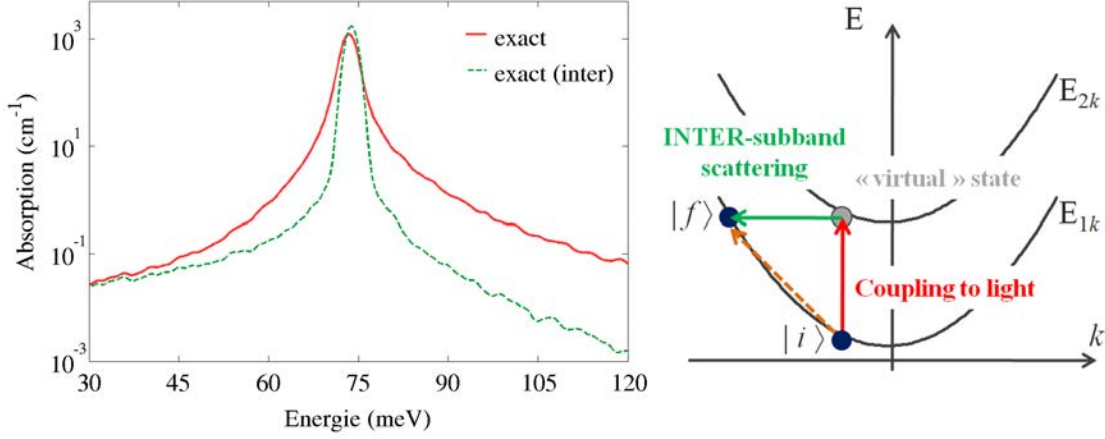


FIGURE III.9 – Graphe de gauche : Spectres d'absorption pour la transition $E_1 - E_2$ calculés par diagonalisation numérique du Hamiltonien H complet (continu rouge) ou en incluant dans H uniquement les termes de couplage inter-sousbande (pointillé vert). Le terme de désordre V_{dis} dans H correspond au potentiel de désordre d'interface caractérisé par les paramètres $f_{\text{def}} = 0.30$, $h_{\text{def}} = 2.83 \text{ \AA}$ et $\sigma = 3.6 \text{ nm}$. $N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = N_{\text{def}}/2$. $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $T = 100 \text{ K}$. $E_2 - E_1 = 73.8 \text{ meV}$. 50 configurations aléatoires de désordre. Schéma de droite : Représentation du mécanisme d'absorption par porteurs libres intra-sousbande $|1\vec{k}\rangle \rightarrow |1\vec{k}'\rangle$ médié par un défaut d'interface. Cette transition implique un couplage électron-défaut inter-sousbande.

L'approche perturbative développée au chapitre II conduit à des estimations de pertes par porteurs libres similaires à celles obtenues par un calcul numérique où tous les termes de couplage sont pris en compte sans approximation. Néanmoins, le rôle joué par les différents couplages intra- et inter-sousbande tel que nous l'avons établi pour cette structure est loin d'être aussi bien défini dans le cas d'une structure où la différence d'énergie $E_2 - E_1$ est du même ordre de grandeur que l'élément de matrice $V_{\text{def}}^{\text{inter}}$. Dans ce cas limite, la gamme d'énergie pour laquelle se manifeste un fort mélange des états s'étend sur l'intervalle $[E_1; E_2]$. Par ailleurs, si $E_2 - E_1 < E_{\text{lias}}$ il arrive même que des états liés de la sous-bande 2 se retrouvent à des énergies inférieures au minimum de la sous-bande 1. Ce régime de fort mélange est difficilement accessible en présence de défauts d'interface uniquement car ils génèrent des puits de potentiels peu profonds. Par contre, le cas d'une telle structure en présence des impuretés ionisées, où cette limite est atteinte, sera traitée en section III.5.3.

III.4.3 Autres modèles d'absorption

Alors qu'il est important de comprendre quels sont les effets et les mécanismes physiques qui dominent les différents domaines d'énergie du spectre d'absorption, il est également intéressant de vérifier la validité des approximations faites dans les

autres approches fréquemment utilisées pour le calcul de l'absorption, ainsi que leurs éventuelles déviations par rapport à notre approche exacte.

Parmi ces autres modèles d'absorption, une variante microscopique du modèle lorentzien discuté au chapitre I a été développée par Unuma *et al.* [114] en suivant l'approche d'Ando [63]. Dans le modèle d'Unuma *et al.*, l'élargissement Γ de la raie lorentzienne, habituellement phénoménologique, acquiert un statut de grandeur qui dépend explicitement de la structure, de l'indice de bande des états impliqués et des paramètres de désordre et de phonon. Pour la transition $n \rightarrow n'$, le coefficient d'absorption est proportionnel à la conductivité optique du système :

$$\text{Re}[\sigma(\omega)] = \frac{e^2 f_{nn'}}{2\pi\hbar} \int d\varepsilon f(\varepsilon) \frac{\Gamma(\varepsilon)}{\Gamma(\varepsilon)^2 + (E_{n'} - E_n - \hbar\omega)^2} \quad (\text{III.31})$$

où $f_{nn'}$ est la force d'oscillateur du couplage dipolaire $n \leftrightarrow n'$, $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ est l'énergie cinétique et $f(\varepsilon)$ désigne le terme d'occupation des états. Le paramètre Γ tient compte des diffusions élastiques (ou inélastiques) intra- et inter-sousbande.

$$\Gamma(\varepsilon) = \frac{1}{2} [\Gamma_{\text{intra}}(\varepsilon) + \Gamma_{\text{inter}}(\varepsilon)] \quad (\text{III.32})$$

Ces deux contributions de l'élargissement de la raie d'absorption dépendent des éléments de matrice microscopiques du désordre :

$$\Gamma_{\text{intra}}(\varepsilon) = 2\pi \sum_{\vec{k}'} \left| \langle n\vec{k}' | V_{\text{dis}} | n\vec{k} \rangle - \langle n'\vec{k}' | V_{\text{dis}} | n'\vec{k} \rangle \right|^2 \delta[\varepsilon(k) - \varepsilon(k')] \quad (\text{III.33})$$

$$\Gamma_{\text{inter}}(\varepsilon) = 2\pi \sum_{\vec{k}'} \left| \langle n\vec{k}' | V_{\text{dis}} | n'\vec{k} \rangle \right|^2 \delta[\varepsilon(k) - \varepsilon(k') + E_{n'} - E_n] \quad (\text{III.34})$$

Afin de comparer cette approche à notre résultat numérique, nous avons calculé les éléments de matrice de diffusion des expressions (III.33) et (III.34) pour le cas du potentiel de désordre d'interface. A partir de notre modélisation de la rugosité d'interface et des paramètres de désordre considérés précédemment pour la diagonalisation numérique, ces calculs conduisent aux expressions suivantes :

$$\Gamma_{\text{intra}}(x) = \frac{4\pi^2 \sigma^4 V_b^2 m^*}{\hbar^2} e^{-\eta x} I_0(\eta x) \sum_{z_0} [n_{\text{att}} |u_{nn}^{\text{att}}(z_0)|^2 + n_{\text{rep}} |u_{nn}^{\text{rep}}(z_0)|^2] \quad (\text{III.35})$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{inter}}(x) = \frac{4\pi^2 \sigma^4 V_b^2 m^*}{\hbar^2} e^{-2m^*(E_{n'} - E_n)\sigma^2/\hbar^2} e^{-\eta x} I_0(\eta \sqrt{x^2 + \beta(E_{n'} - E_n)x}) \\ \times \sum_{z_0} [n_{\text{att}} |\tilde{u}_{nn'}^{\text{att}}(z_0)|^2 + n_{\text{rep}} |\tilde{u}_{nn'}^{\text{rep}}(z_0)|^2] \end{aligned} \quad (\text{III.36})$$

où les intégrales $\tilde{u}_{nn'}^{\text{att}}$ et $\tilde{u}_{nn'}^{\text{rep}}$ sont explicitement données en (III.27) et u_{nn}^{att} et u_{nn}^{rep} en (II.19) et (II.20). La fonction I_0 est, comme au chapitre précédent, la fonction de Bessel d'ordre 0 et d'argument imaginaire, $\eta = \frac{4m^*\sigma^2}{\beta\hbar^2}$ et x est une variable d'intégration sans dimension. L'élargissement total Γ étant proportionnel à la somme de Γ_{intra} et Γ_{inter} , celui-ci vaut alors :

$$\Gamma = \frac{Sm^*k_B T}{4\pi\hbar^2} \int_0^\infty dx \frac{1}{1 + e^{x/\gamma}} [\Gamma_{\text{intra}}(x) + \Gamma_{\text{inter}}(x)] \quad (\text{III.37})$$

Le facteur γ de la distribution de Boltzmann dans (III.37) vaut par ailleurs :

$$\gamma = e^{-\beta E_n} \frac{n_e \pi \hbar^2}{e^{(-\beta E_n + e^{-\beta E_{n'}})} m^* k_B T} \quad (\text{III.38})$$

avec :

$$(n_n - n_{n'}) = n_e \left[\frac{1 - e^{-\beta(E_{n'} - E_n)}}{1 + e^{-\beta(E_{n'} - E_n)}} \right] \quad (\text{III.39})$$

Nous avons converti la conductivité optique ainsi évaluée en coefficient d'absorption en utilisant la relation suivante :

$$\alpha(\omega) = \frac{\text{Re}[\sigma(\omega)]}{2cn_r \varepsilon_0} \quad (\text{III.40})$$

Le calcul complet de cette grandeur aboutit finalement à :

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2 |\langle n | p_z | n' \rangle|^2}{4m^{*2} cn_r \varepsilon_0 \omega L_z} n_e \left[\frac{1 - e^{-\beta(E_{n'} - E_n)}}{1 + e^{-\beta(E_{n'} - E_n)}} \right] \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + (E_{n'} - E_n - \hbar\omega)^2} \quad (\text{III.41})$$

Un autre point important est de comprendre comment ces résultats numériques de diagonalisation numérique se comparent aux approches de fonctions de corrélation, essentiellement basées sur le formalisme des fonctions de Green. Dans le cas spécifique de notre structure désordonnée aux interfaces, celui-ci peut lui aussi être utilisé pour déterminer la conductivité optique et ainsi obtenir par la relation (III.40) le coefficient d'absorption correspondant. Le calcul de cette conductivité a été effectué par Wacker *et al.* pour lequel le formalisme des fonctions de Green- Keldysh [115] (NEGF pour “*Non-Equilibrium Green Function*”) a été appliqué en utilisant l'implémentation numérique décrite en [116] et [117]. Dans le but de rendre cette comparaison pertinente, nous avons extrait numériquement les longueurs de corrélation et la profondeur moyenne des défauts de notre modèle de désordre aléatoire et nous avons utilisé ces paramètres comme paramètres de d'ajustement dans ce modèle NEGF³.

Nous montrons sur la figure III.10 le spectre d'absorption pour la transition optique $n = 1 \rightarrow n' = 2$ de notre structure de double puits quantique. Ces spectres sont évalués par notre diagonalisation exacte, par le modèle d'Unuma *et al.* et par le modèle NEGF de Wacker *et al.* décrits précédemment. Remarquons que le modèle NEGF apporte une bonne description de l'absorption des basses énergies mais par contre, échoue pour la description de l'aile de haute énergie. Cette déviation est en réalité due à une approximation numérique qui consiste à considérer que les diffuseurs du système sont des diffuseurs “delta” [76, 115, 117]. Ceci donne alors lieu à des éléments de matrice de diffusion indépendants de \vec{k} . Bien que cette approximation simplifie radicalement l'implémentation numérique de ce formalisme dense et complexe, elle surestime néanmoins la diffusion à grand transfert de vecteur d'onde, ce qui est en réalité crucial pour les ailes d'absorption. L'absorption y est par conséquent surestimée d'un facteur 3 par rapport au calcul de diagonalisation numérique. Parallèlement, le comportement aux basses énergies et à la résonance

3. L'approche NEGF de Wacker *et al.* utilise le modèle de désordre d'interface basé sur les corrélations entre défauts. Les relations de passage d'un modèle de désordre à l'autre que nous avons établies en section I.5.3 nous permettent de déterminer les paramètres d'ajustement équivalents.

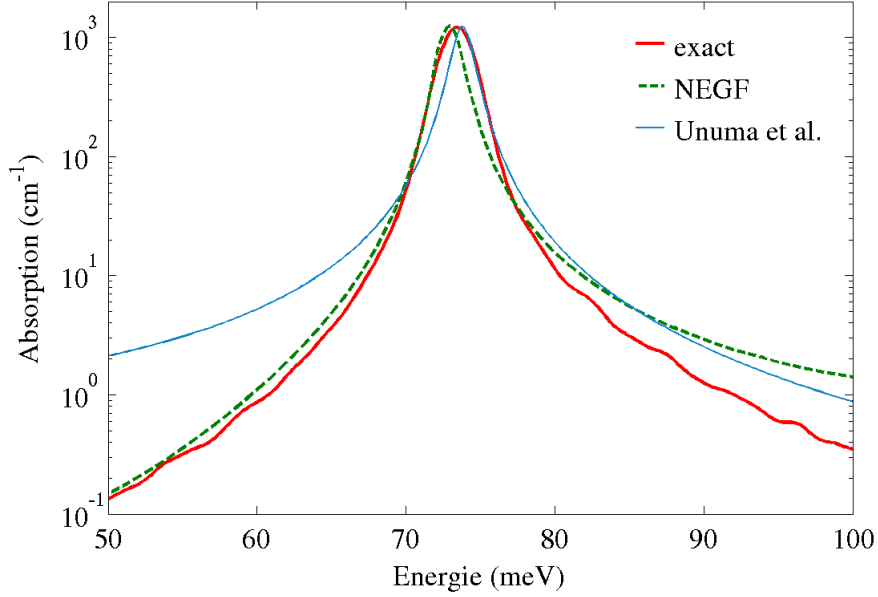


FIGURE III.10 – Spectres d’absorption pour la transition $E_1 - E_2$ calculés à partir de trois modèles différents : diagonalisation numérique du Hamiltonien H (continu rouge), formalisme des fonctions de Green-Keldysh (NEGF) (pointillé vert) et approche d’Unuma *et al.* (continu bleu). Le terme de désordre V_{dis} dans H correspond au potentiel de désordre d’interface caractérisé par les paramètres $f_{\text{def}} = 0.30$, $h_{\text{def}} = 2.83 \text{ \AA}$ et $\sigma = 3.6 \text{ nm}$. $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $E_2 - E_1 = 73.8 \text{ meV}$. $T = 100 \text{ K}$. 50 configurations aléatoires de défauts d’interface pour le calcul numérique.

reste très bien décrit ici car les self-energies couvrent complètement les termes de diffusion inter-sousbande (à plus faible transfert de vecteur d’onde) qui, comme d’après la discussion précédente, dominent cette partie du spectre.

Le modèle d’Unuma *et al.* présente lui aussi un excellent accord au niveau de la raie centrale d’absorption mais dévie significativement aux ailes de hautes et de basses énergies pour lesquelles une surestimation systématique de l’absorption est observée par rapport aux deux autres approches (notons jusqu’à un facteur 10 par rapport au calcul numérique). Il est donc clair que cette approche “quasi-lorentzienne” apporte une description pauvre de l’absorption par porteurs libres. Ceci est plus probablement dû au fait que, contrairement au modèle NEGF, les composantes hors-diagonales des fonctions de Green sont négligées tandis que les composantes diagonales sont évaluées à l’approximation de Born auto-cohérente [63, 114]. En d’autres termes, le mélange des fonctions d’onde par le désordre, qui s’avère être essentiel à la description des queues d’absorption, n’est pas pris en compte dans l’approche d’Unuma *et al.*. Au voisinage de la résonance inter-sousbande, là où l’élargissement est dominé par les diffusions intra-sousbande, les deux modèles apportent une description satisfaisante puisqu’ici le mélange des fonctions d’onde a un effet négligeable comparé à l’élargissement des états.

Notre calcul numérique (et aussi perturbatif) des transitions intra- et inter-sousbande dues au désordre conduit à des formes de raie d’absorption différentes des ailes de la raie quasi-lorentzienne considérée par Unuma *et al.*. Ces deux calculs sont réalisés dans des régimes différents. Dans le modèle d’Unuma *et al.*, les con-

sidérations de départ sont des transitions inter-sousbande autorisées (c'est-à-dire verticales dans l'espace des \vec{k}). Le coefficient d'absorption inter-sousbande $\alpha_{12}(\omega)$ est une fonction δ d'argument $(\hbar\omega - E_2 - E_1)$ élargie en raie lorentzienne par le désordre. Remarquons d'ailleurs que l'absorption intégrée $\int \alpha(\omega)d\omega$ est essentiellement indépendante de la concentration de diffuseurs⁴. Par conséquent, dans ce type d'approche, nous trouvons que $\int \alpha(\omega)d\omega \approx (n_{\text{def}})^0$. Dans nos estimations perturbatives et numériques exactes, un tel facteur $(n_{\text{def}})^0$ est absent et à l'ordre le plus bas, nous trouvons à la place une absorption intégrée qui dépend linéairement de la concentration n_{def} . Ceci est dû au fait que nous concentrons notre attention sur des transitions obliques en \vec{k} qui sont bel et bien interdites en absence de désordre.

Enfin, remarquons que pour la raie centrale à la résonance, les modèles NEGF et d'Unuma *et al.* présentent des largeurs de raie à mi-hauteur similaires sans l'utilisation d'aucun autre paramètre ajustable. Celles-ci valent respectivement 1.6 meV et 1.8 meV et sont également en bon accord avec la valeur de 2.1 meV de notre calcul numérique. Rappelons que l'absorption réelle de ce modèle d'absorption résulte de la convolution entre les effets d'élargissement intrinsèques et l'élargissement numérique (à travers le paramètre σ_G) que nous devons introduire pour tenir compte de la taille finie de l'échantillon.

III.5 Absorption en présence d'impuretés ionisées

Dans les LCQ, les impuretés ionisées sont des sources de diffusion efficaces et inévitables à cause de la nécessité d'apporter des porteurs par dopage de la structure [118]. Dans cette section et par analogie à la précédente, nous présentons les résultats du calcul de la raie d'absorption inter-sousbande $n = 1 \rightarrow n' = 2$ pour notre structure de double puits quantique dans laquelle un unique plan de dopage est introduit. Nous procédons alors à la diagonalisation du Hamiltonien H où le terme de désordre V_{dis} correspond au potentiel coulombien généré par la distribution aléatoire de 8 dopants sur le plan $L_x \times L_y$ ⁵.

III.5.1 Écrantage

Contrairement au modèle perturbatif du chapitre II où toutes les divergences en q^{-1} du potentiel coulombien disparaissaient dans le calcul de α_{imp} , les éléments de matrice exacts inclus dans H contiennent explicitement des termes en $q_{ii'}^{-1}$, divergents pour des éléments de base de même indice ($\vec{k}_i = \vec{k}_{i'}$). Notre approche numérique ne pouvant traiter ces pôles, il est désormais nécessaire d'écranter le potentiel coulombien. Avant tout calcul de spectre d'absorption, il est donc important d'exposer les différentes approximations d'écrantage que nous avons utilisées.

Evaluer le potentiel coulombien écrané dans des hétérostructures réalistes constitue une tâche complexe qui nécessite une résolution numérique. Le modèle d'écrantage le plus complet est le modèle RPA qui consiste à résoudre de manière auto-

4. Intégrer une fonction lorentzienne normée donne une quantité qui ne dépend pas de sa largeur Γ .

5. Comme au chapitre II, ce nombre d'impuretés est obtenu par conversion de la densité de porteurs n_e sur une surface de $200 \times 200 \text{ nm}^2$.

cohérente le potentiel réel induit par les porteurs dont les populations peuvent être traitées hors équilibre [119]. Mais une situation plus simple, celle d'une impureté ionisée écrantée par un gaz d'électrons à l'équilibre thermique peut être calculée analytiquement [120]. Le potentiel de diffusion effectif peut dans ce cas être défini comme étant la somme du potentiel non écranté (V_{imp}) et du potentiel généré par les charges induites (V_{ind}) :

$$V_{\text{eff}}(\vec{r}) = V_{\text{imp}}(\vec{r}) + V_{\text{ind}}(\vec{r}) \quad (\text{III.42})$$

A l'approximation de champ moyen, l'évolution du potentiel induit est gouvernée par l'équation de Poisson :

$$\nabla^2 V_{\text{ind}}(\vec{r}) = -\frac{e\rho_{\text{ind}}(\vec{r})}{\varepsilon_0\varepsilon_r} \quad (\text{III.43})$$

dont la résolution dans l'espace des moments \vec{q} conduit à la relation :

$$V_{\text{ind}}(\vec{q}) = \frac{e\rho_{\text{ind}}(\vec{q})}{\varepsilon_0\varepsilon_rq^2} = V_{e-e}(\vec{q})\Pi(\vec{q})V_{\text{eff}}(\vec{q}) \quad (\text{III.44})$$

où $V_{e-e}(\vec{q}) = \frac{e^2}{\varepsilon_0\varepsilon_rq^2}$ est l'élément de matrice de l'interaction électron-électron non écranté (à trois dimensions) et où $\Pi(\vec{q})V_{\text{eff}}(\vec{q})$ est la charge induite. Cette expression donne alors un potentiel effectif auto-cohérent qui peut désormais s'exprimer ainsi :

$$V_{\text{eff}}(\vec{q}) = \frac{V_{\text{imp}}(\vec{q})}{1 - V_{e-e}(\vec{q})\Pi(\vec{q})} \quad (\text{III.45})$$

L'hypothèse d'un écrantage statique conduit alors à l'expression suivante pour la charge induite :

$$\Pi(\vec{q}) = \frac{2}{\Omega} \frac{\partial}{\partial \mu_C} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} = \frac{\partial n_{3D}}{\partial \mu_C} \quad (\text{III.46})$$

où Ω est le volume de l'échantillon et où $n_{3D} = n_e/L_z$ est la concentration volumique de porteurs équivalente. A partir de la définition de la longueur d'écrantage inverse suivante :

$$q_{\text{SC}} = \lambda_{\text{SC}}^{-1} = \sqrt{\frac{e^2}{\varepsilon_0\varepsilon_r} \frac{\partial n_{3D}}{\partial \mu_C}} \quad (\text{III.47})$$

le potentiel coulombien effectif devient alors :

$$V_{\text{eff}}(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r\vec{r}} e^{-q_{\text{SC}}|\vec{r}|} = V_{\text{imp}}(\vec{r}) e^{-q_{\text{SC}}|\vec{r}|} \quad (\text{III.48})$$

Cette expression simple révèle clairement le rôle de la longueur d'écrantage : le potentiel coulombien est exponentiellement atténué et neutralisé aux distances supérieures à λ_{SC} . Notons qu'une configuration diluée de désordre correspond au cas où la distance moyenne entre impuretés est supérieure à la longueur d'écrantage. Ce cas de figure est tout à fait réalisé pour les concentrations de donneurs que nous considérons ($\sim 10^{10} \text{ cm}^{-2}$). La dérivée partielle de la relation (III.47) peut être évaluée dans deux régimes limites différents.

Premièrement, la limite non-dégénérée des hautes températures (ou des faibles densités électroniques) où la distribution des électrons peut être approximée par une distribution de Boltzmann donne :

$$\frac{\partial n_{3D}}{\partial \mu_C} = \frac{2}{\Omega} \frac{\partial}{\partial \mu_C} \left[\sum_{\vec{k}} e^{-\beta(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu_C)} \right] = \frac{n_{3D}}{k_B T} \quad (\text{III.49})$$

D'où il vient :

$$\lambda_{SC}^{-1} \equiv \lambda_D^{-1} = q_D = \sqrt{\frac{e^2 n_{3D}}{\varepsilon_0 \varepsilon_r k_B T}} \quad (\text{III.50})$$

La grandeur λ_D est appelée longueur d'écrantage de Debye-Hückel.

Le second régime, appelé écrantage de Thomas-Fermi, correspond au cas dégénéré dans la limite des basses températures pour lesquelles les distributions thermiques des porteurs sont approximées par des fonctions de Heaviside : $f_{\vec{k}} = \Theta(\mu_C - \varepsilon)$. L'accumulation de charge qui en résulte vaut alors :

$$\frac{\partial n_{3D}}{\partial \mu_C} \approx \frac{m^*}{\pi^{4/3} \hbar^2} (n_{3D})^{1/3} \quad (\text{III.51})$$

Il a été montré que lorsque la longueur d'écrantage est du même ordre de grandeur, voire supérieure à la longueur de la structure (ou à la longueur de la période du LCQ par exemple), tous les électrons contribuent à l'écrantage et par conséquent, le modèle d'écrantage statique isotrope décrit précédemment donne un excellent accord avec le calcul complet du modèle RPA considérant des distributions de porteurs hors équilibre [120].

Pour notre structure faiblement dopée, nous utilisons le modèle de Debye pour décrire l'écrantage des donneurs. Nous considérons donc la décomposition de Fourier du potentiel de Coulomb écranté (généré par la distribution des 8 impuretés) suivante :

$$V_{\text{imp}}(\vec{q}) = \frac{e^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_r \Omega} \sum_{\vec{r}_p} \sum_{\vec{q}} \frac{e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_p)}}{q^2 + q_D^2} \quad (\text{III.52})$$

où $\vec{q} = (\vec{Q}, q_z)$ et où $\vec{r}_p = (\vec{\rho}_j, z_l)$ sont les coordonnées tridimensionnelles des impuretés ionisées. L'intensité de ce potentiel dépend fortement de la longueur de Debye inverse q_D . D'après l'expression (III.50), une dépendance en température des éléments de matrice de diffusion $V_{\text{imp}}^{nn'}$ apparaît. La figure III.11 présente l'évolution de la longueur d'écrantage λ_D en fonction de la densité de porteurs (graphe a) et de la température électronique T (graphe b). A une température $T = 100$ K et pour la concentration $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, celle-ci s'élève à 23.5 nm. Notons qu'une augmentation de la température (ou une diminution de la densité n_e) implique une augmentation de cette longueur et par conséquent, une augmentation de la portée des impuretés ionisés. Le potentiel coulombien devient ainsi plus efficace à haute température (ou aux faibles concentrations n_e car faiblement écranté). En revanche, une diminution de la température nous impose de considérer le régime d'écrantage de Thomas-Fermi dont l'évolution de la longueur d'écrantage est montrée en comparaison sur les graphes de la figure III.11. Dans le cadre de notre étude de la forme de raie d'absorption dans les structure à cascade quantique, nous nous limiterons au

régime d'écrantage de Debye en considérant des températures proches de celles du régime de fonctionnement des LCQ ($T \geq 100$ K).

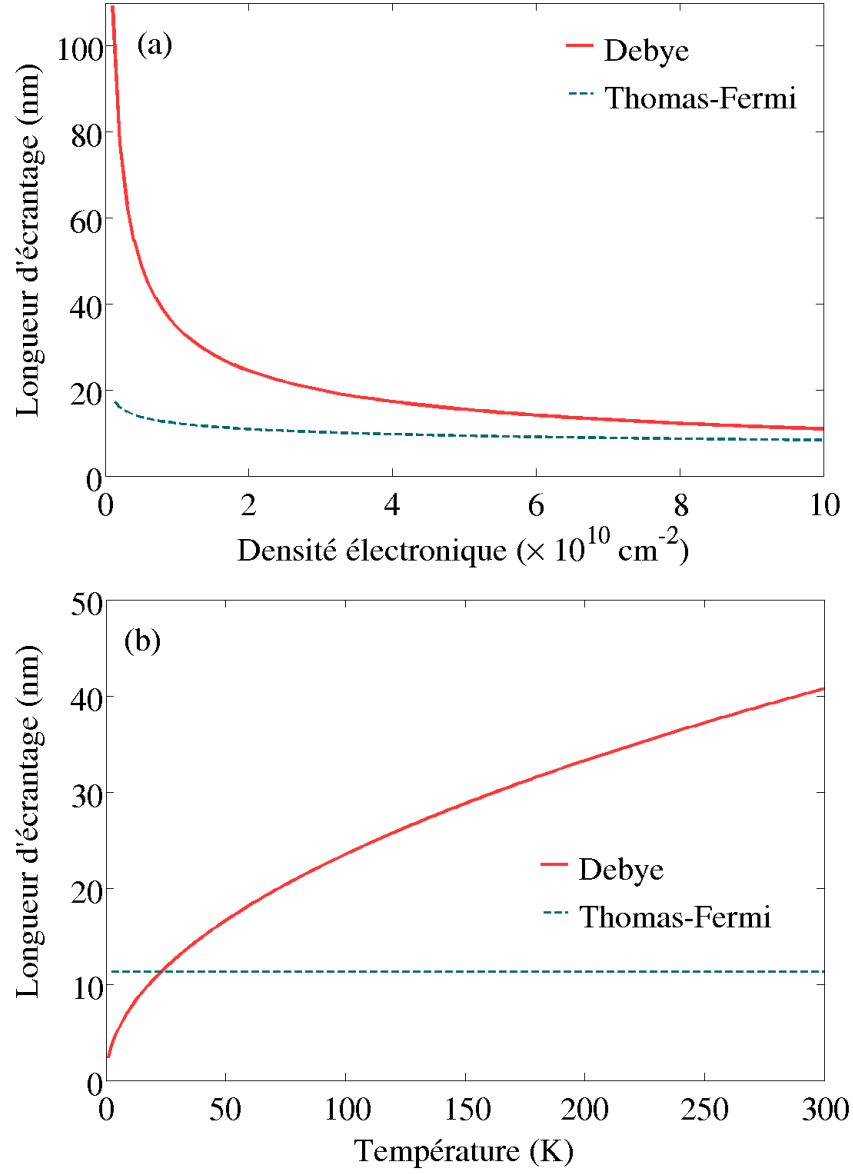


FIGURE III.11 – Evolution de la longueur d'écrantage en fonction de la densité surfacique d'électrons (graphe a, $T = 100$ K) et de la température électronique (graphe b, $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$). La longueur d'écrantage est évaluée dans le régime de Debye-Hückel (continu rouge) et dans le régime de Thomas-Fermi (pointillé vert).

III.5.2 Ingénierie de dopage

Il existe de nombreuses possibilités d'ajuster les largeurs et les hauteurs des barrières des structures à multi-puits quantiques dans le but de produire un spectre donné d'états d'énergie et d'ajuster les raies d'absorption/émission inter-sousbande [11]. L'accomplissement ultime de cet ingénierie de bande est certainement la réalisation des structures de LCQ. La forme et la largeur de raie sont par ailleurs directement reliées aux efficacités des mécanismes de diffusion [61]. Dans cette sec-

tion, nous illustrons cette dépendance en montrant qu'une position particulièrement bien choisie du plan de dopage dans la structure permet un ajustement de la forme de raie et peut notamment donner lieu à un affinement de cette dernière mais aussi à l'apparition d'une deuxième raie secondaire [103].

En considérant le régime d'écrantage de Debye, l'élément de matrice du potentiel coulombien écranté entre deux éléments de la base numérique de H vaut :

$$\langle n\vec{k}_i | V_{\text{eff}} | n'\vec{k}_{i'} \rangle = -\frac{e^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_r \Omega S} \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \sum_{\vec{Q}} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{\rho}_j} \int dz \sum_{q_z} \chi_n(z) \chi_{n'}(z) e^{iq_z(z-z_l)} \times \iint d^2\rho \frac{e^{-i(\vec{k}_i - \vec{k}_{i'} - \vec{Q}) \cdot \vec{\rho}}}{Q^2 + q_z^2 + q_D^2} \quad (\text{III.53})$$

L'intégrale sur ρ donne une fonction delta $\delta[\vec{Q} - (\vec{k}_{i'} - \vec{k}_i)]$. La somme sur \vec{Q} impose alors la condition $\vec{Q} = \vec{k}_{i'} - \vec{k}_i \equiv \vec{Q}_{ii'}$. La somme sur q_z peut quant à elle être transformée en intégrale et être calculée analytiquement dans la plan complexe :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dq_z \chi_n(z) \chi_{n'}(z) \frac{e^{iq_z(z-z_l)}}{Q_{ii'}^2 + q_D^2 + q_z^2} = \pi \chi_n(z) \chi_{n'}(z) \frac{e^{-\sqrt{Q_{ii'}^2 + q_D^2}|z-z_l|}}{\sqrt{Q_{ii'}^2 + q_D^2}} \quad (\text{III.54})$$

D'où l'expression finale de l'élément de matrice de désordre :

$$\langle n\vec{k}_i | V_{\text{eff}} | n'\vec{k}_{i'} \rangle = -\frac{e^2}{2\varepsilon_0 \varepsilon_r S} \sum_p \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} e^{i\vec{Q}_{ii'} \cdot \vec{\rho}_j} \int dz \chi_n(z) \chi_{n'}(z) \frac{e^{-\sqrt{Q_{ii'}^2 + q_D^2}|z-z_l|}}{\sqrt{Q_{ii'}^2 + q_D^2}} \quad (\text{III.55})$$

Le coefficient d'absorption est calculé comme précédemment à partir de l'expression (III.17) en fonction de l'énergie $\hbar\omega$. Les spectres d'absorption présentés dans la suite sont issus d'une moyenne de l'absorption sur 50 configurations de coordonnées aléatoires $\vec{\rho}_j$ d'impureté et quatre positions du plan de dopage (z_l) sont considérées. La figure III.12 présente le profil de bande de conduction du double puits quantique asymétrique ainsi que les différentes positions des donneurs. La première d'entre elles, $z_1 = 3$ nm, se situe dans le puits le plus large de la structure et correspond à une abscisse où l'amplitude de la fonction d'onde enveloppe $|\chi_1|^2$ est supérieure à $|\chi_2|^2$: $|\chi_1(z_1)|^2 > |\chi_2(z_1)|^2$. La seconde, $z_2 = 12.3$ nm, correspond à la situation inverse puisqu'elle coïncide avec le maximum de la fonction $|\chi_2|^2$: $|\chi_2(z_2)|^2 > |\chi_1(z_2)|^2$. La troisième position du plan de dopage, $z_3 = 8.45$ nm, est celle où les deux densités de probabilité sont égales : $|\chi_1(z_3)|^2 \approx |\chi_2(z_3)|^2$. Et enfin, la dernière position $z_4 = -5$ nm se situe dans la barrière injectrice où les densités de probabilité électroniques sont proches de zéro : $|\chi_1(z_4)|^2 \approx |\chi_2(z_4)|^2 \approx 0$.

Il est intéressant d'étudier dans un premier temps l'efficacité de diffusion des donneurs en fonction de leur emplacement dans le double puits quantique. Pour cela, le formalisme NEGF est bien utile puisqu'il donne accès aux fonctions spectrales qui contiennent cette information. De manière simplifiée, la largeur de la fonction spectrale $A_n(\varepsilon, k)$ d'un état d'énergie $E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ nous renseigne sur l'efficacité du mélange des états par le potentiel de désordre. Celle-ci s'exprime en terme de la self-énergie retardée de l'électron $\Sigma_n(\varepsilon, k)$ [115] :

$$A_n(\varepsilon, k) = -\frac{2\text{Im}[\Sigma_n(\varepsilon, k)]}{\left(\varepsilon - E_n - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \text{Re}[\Sigma_n(\varepsilon, k)]\right)^2 + \text{Im}[\Sigma_n(\varepsilon, k)]^2} \quad (\text{III.56})$$

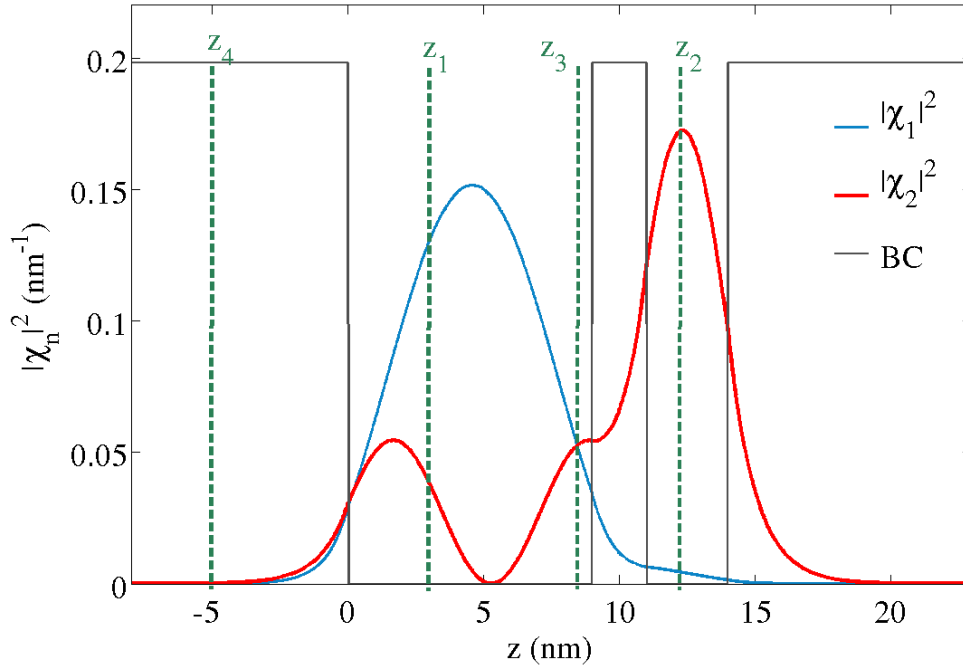


FIGURE III.12 – Profil de la bande de conduction (trait continu gris) et modules carrés des fonctions d'onde enveloppe χ_1 (trait continu bleu) et χ_2 (trait continu rouge) de la structure de double puits quantique 9/2/3 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75}. Les plans de dopage, repérés par la coordonnée z_l ($l = 1, 2, \dots, 4$), sont représentés par les lignes verticales vertes. $z_1 = 3$ nm, $z_2 = 12.3$ nm, $z_3 = 8.45$ nm et $z_4 = -5$ nm.

La figure III.13 présente les fonctions spectrales de deux états issus des sous-bandes 1 et 2 et d'énergie respective 58 meV et 130 meV. Ces courbes ont été calculées par Wacker *et al.* [103]. Ces trois graphes correspondent aux trois positions z_l , $l = 1, 2, 3$ de dopage présentées sur la figure III.12. Les deux énergies choisies pour ces courbes sont associées à des états de sous-bandes différentes qui ont approximativement la même énergie cinétique pour le mouvement dans le plan. A $z_l = 3$ nm, une position où la sous-bande 1 est plus affectée par le potentiel coulombien que la sous-bande 2, la largeur de la fonction spectrale de l'état 1 est plus importante que celle de l'état 2. Les états de la sous-bande 1 subissent un mélange plus fort que ceux de la sous-bande 2 par le désordre. Au contraire, à la position $z_l = 12.3$ nm, l'état 2 est le plus affecté par le potentiel coulombien et présente donc une plus large fonction spectrale que l'état 1. Enfin, à la position $z_l = 8.45$ nm, les fonctions spectrales sont très similaires car les deux sous-bandes sont affectées de la même manière par les donneurs ($|\chi_1(z_l)|^2 \approx |\chi_2(z_l)|^2$). De plus, évaluer la conductivité dynamique de toutes les corrections des self-énergies conduit à une largeur de raie d'absorption qui est typiquement de l'ordre de $-2\Im[\Sigma]$ pour les états impliqués dans le processus d'absorption [121]. Dans toutes ces situations, la largeur des fonctions spectrales est de l'ordre de 10 meV et par conséquent, une largeur de raie d'absorption du même ordre de grandeur est attendue pour les spectres d'absorption.

Par ailleurs, puisque nous considérons une concentration diluée de donneurs, l'expression de l'élément de matrice de diffusion (III.55) peut être réduite suivant

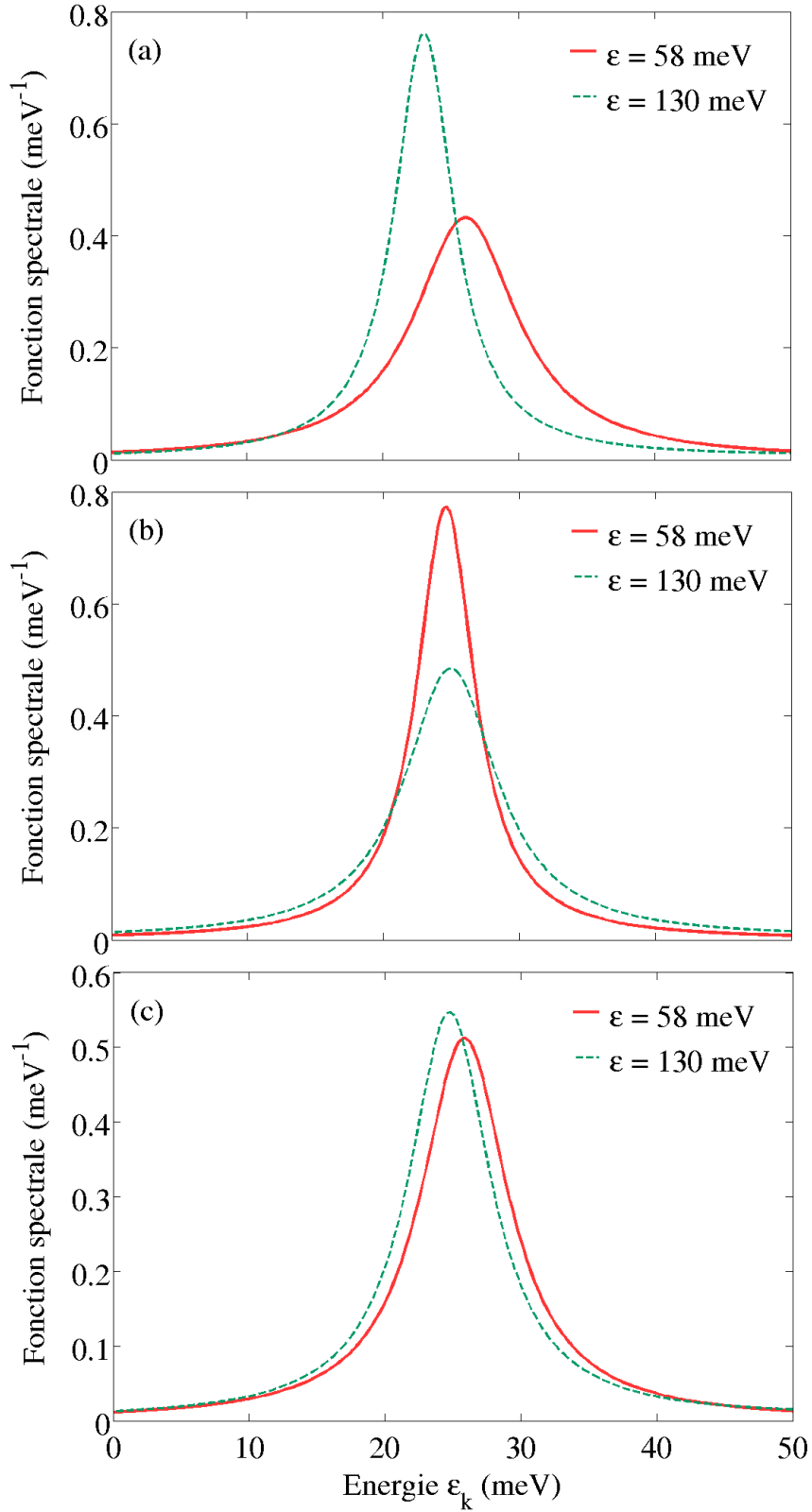


FIGURE III.13 – Fonctions spectrales calculées par modèle NEGF de Wacker *et al.* de deux états propres du Hamiltonien H en présence de 8 impuretés sur le plan de coordonnée z_l et d'énergies respectives 58 meV (continu rouge) et 130 meV (pointillé vert). Ce calcul a été effectué pour les trois positions de dopage suivantes : $z_l = 3 \text{ nm}$ (a), $z_l = 12.3 \text{ nm}$ (b) et $z_l = 8.45 \text{ nm}$ (c). $n_e = n_{\text{imp}} = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Structure $9/2/3 \text{ nm}$ de $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.25}\text{GaAs}_{0.75}$.

deux cas limites. Sauf au voisinage d'un centre donneur, $(\vec{\rho} - \vec{\rho}_p) \gg |z - z_l|$ et l'élément de matrice à une impureté se réduit alors à :

$$V_{\text{don}}^{nn'}(|\vec{\rho} - \vec{\rho}_p|) \approx -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r|\vec{\rho} - \vec{\rho}_p|} \exp\left(-\frac{|\vec{\rho} - \vec{\rho}_l|}{\lambda_D}\right) \delta_{nn'} \quad (\text{III.57})$$

Au voisinage du centre de l'impureté par contre, nous avons :

$$V_{\text{don}}^{nn'}(|\vec{\rho} - \vec{\rho}_p|) \approx -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r\chi_n(z_l)\chi_{n'}(z_l)\ln(|\vec{\rho} - \vec{\rho}_p|)} \quad (\text{III.58})$$

Il émerge donc de cette expression qu'au voisinage du diffuseur, le potentiel coulombien effectif a une divergence plus faible que la loi de Coulomb en $1/\rho$ et également, que son intensité à courte portée dépend explicitement de la position du plan de dopage z_l . Les deux différents comportements des réductions (III.57) et (III.58) apparaissent alors comme étant au coeur d'une ingénierie de dopage.

La figure III.14 montre les spectres d'absorption pour les quatre positions du plan de dopage présentées sur la figure III.12. Les spectres sont calculés par diagonalisation numérique du Hamiltonien H . Dans ce calcul, nous négligeons les effets de décalage de dépolarisation car la concentration en porteurs reste très faible. En utilisant l'approche d'Unuma *et al.* et en supposant une force d'oscillateur de 1 et une largeur effective du gaz d'électrons égale à L_z , nous trouvons en effet une énergie plasma de l'ordre de 5 meV, équivalente à un décalage de dépolarisation de l'ordre de 0.17 meV. Cette valeur est clairement négligeable devant les énergies de liaison des impuretés.

Sur la figure III.14, nous notons tout d'abord que les spectres d'absorption sont légèrement décalés par rapport à l'énergie de transition non perturbée $E_2 - E_1 = 73.8$ meV. Ceci correspond au même décalage relatif des fonctions spectrales observée sur la figure III.13. Les spectres d'absorption correspondants aux positions de dopage $z_l = 3$ et 12.3 nm comportent par ailleurs deux raies d'absorption distinctes. Par contre, les positions $z_l = 8.45$ nm et -5 nm ne donnent lieu qu'à une seule raie d'absorption à l'énergie non perturbée dont la largeur est de plus d'un ordre de grandeur plus petite que la largeur des fonctions spectrales de la figure III.13. Ces allures de spectre peuvent être bien comprises en considérant de nouveau les densités d'états du système. Celles-ci sont présentées sur la figure III.15 et sont calculées par diagonalisation numérique de H moyennée sur 50 configurations aléatoires de donneurs.

Pour les faibles valeurs de dopage considérées ici, la densité d'états contient un groupe d'états liés aux impuretés pour lesquels l'énergie de liaison croît avec l'amplitude des éléments de matrice de désordre associés, comme discuté en section III.3. A $z_l = 3$ nm, l'ensemble d'états liés à la sous-bande 1 est plus profond qu'en sous-bande 2. A cause de ce décalage, les transitions optiques entre états liés de E_1 et états quasi-liés de E_2 ont lieu à des énergies supérieures à l'énergie non perturbée $E_2 - E_1$ et sont donc à l'origine de l'existence de la seconde raie d'absorption autour de la valeur 78.5 meV ; tandis que la raie centrale autour de 73.4 meV provient des transitions entre états du pseudo-continuum des deux sous-bandes.

Au contraire, pour $z_l = 12.3$ nm, le groupe des états quasi-liés de la sous-bande 2 est le plus profond et le plus prononcé, ce qui conduit à la situation inverse à la

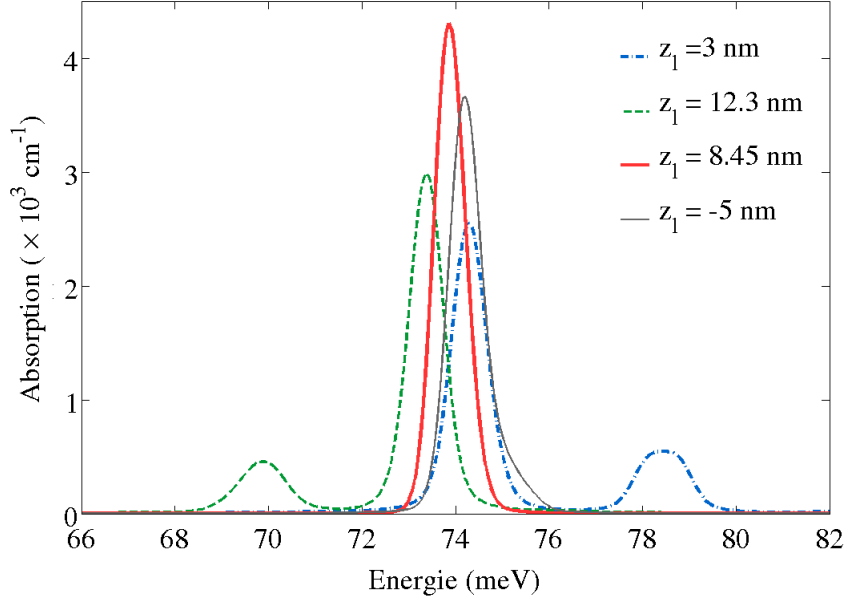


FIGURE III.14 – Spectres d’absorption pour la transition $E_1 - E_2$ calculés par diagonalisation numérique du Hamiltonien H . Le terme de désordre V_{dis} dans H correspond au potentiel coulombien attractif écranté créé par la distribution de 8 impuretés ionisées sur le plan $z_l = 3$ nm (pointillé bleu), $z_l = 12.3$ nm (pointillé vert), $z_l = 8.45$ nm (continu rouge) et $z_l = -5$ nm (continu gris). $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $E_2 - E_1 = 73.8$ meV. $T = 100$ K. 50 configurations aléatoires de donneurs.

précédente. La seconde raie d’absorption des états liés est alors décalée vers le rouge par rapport à la raie des états du pseudo-continuum.

Le cas $z_l = 8.45$ nm est particulier puisque la diffusion est tout autant efficace dans les deux sous-bandes. Les transitions optiques entre les états liés et quasi-liés ont par conséquent lieu à la même énergie que les transitions entre les états du continuum. Le spectre d’absorption ne contient alors qu’une seule et unique raie fine, piquée à l’énergie non perturbée.

La quatrième position, celle qui correspond à un dopage dans la barrière, donne elle aussi un spectre à raie fine unique à l’énergie $E_2 - E_1$ puisque dès lors que les amplitudes de probabilité de présence électronique sur le plan de dopage sont proches de zéro, l’efficacité de diffusion est très faible et les états liés très peu profonds comme le montre le graphe III.15.d. Cela étant, il est intéressant de noter que malgré une diffusion beaucoup plus intense au sein de chaque sous-bande, le dopage à la position $z_l = 8.45$ nm produit une raie d’absorption d’une largeur comparable à celle d’un dopage dans la barrière.

Soulignons par ailleurs que les spectres d’absorption à raie multiple ont déjà été calculés par modélisation numérique dans les super-réseaux et observés expérimentalement dans le cas de super-réseaux et de structures à simples puits quantiques dopés [122–124]. De plus, il est important de remarquer qu’une variation de la température affecterait l’amplitude de chaque raie d’absorption comme discuté par Stehr *et al.* pour le cas d’impuretés très diluées [125]. A basse température par exemple, l’occupation statistique des états liés domine, entraînant alors une augmentation

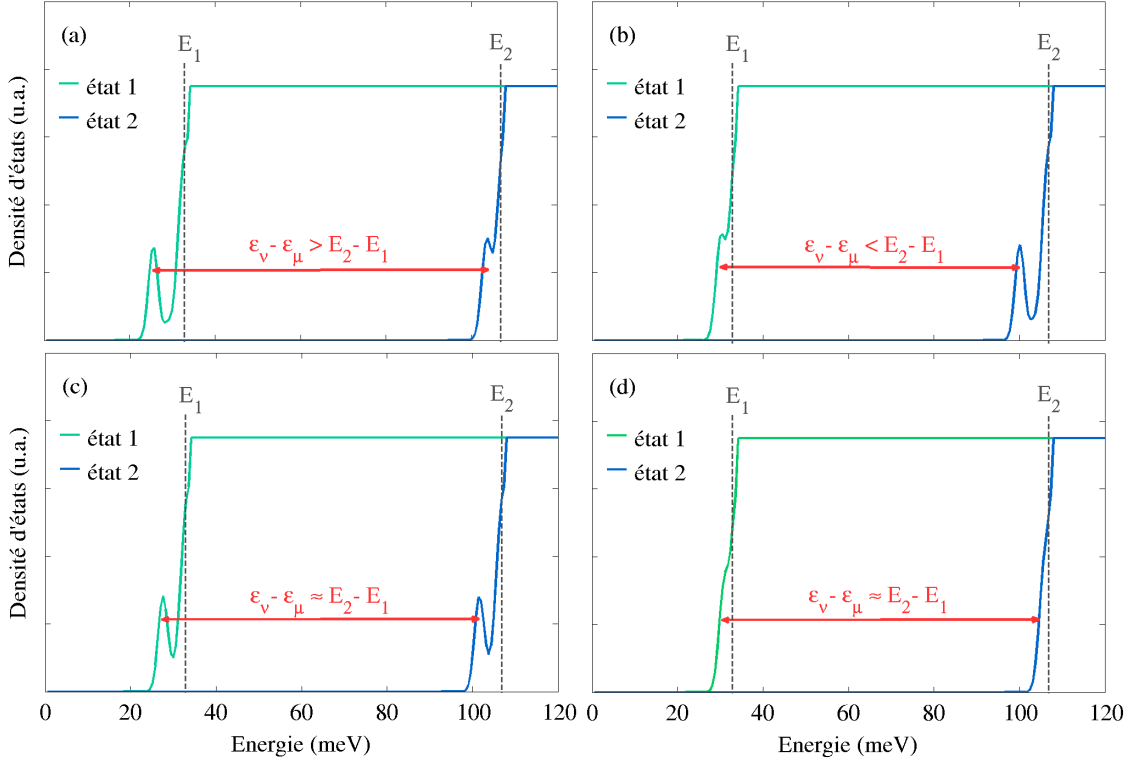


FIGURE III.15 – Densités des états propres du Hamiltonien H associées à la sous-bande 1 (continu vert) et à la sous-bande 2 (continu bleu). Le terme de désordre V_{dis} correspond au potentiel coulombien attractif écranté créé par la distribution de 8 impuretés ionisées placées sur le plan $z_l = 3$ nm (a), $z_l = 12.3$ nm (b), $z_l = 8.45$ nm (c) et $z_l = -5$ nm (d). $E_1 = 33.67$ meV et $E_2 = 107.46$ meV.

(diminution) de la raie secondaire (centrale).

Comme évoqué en section III.4, la plupart des approches perturbatives, telle que l'approximation de Born auto-cohérente, tiennent uniquement compte des termes quadratiques du potentiel de diffusion. Ces méthodes ne sont donc pas capables de prédire l'existence des états liés qui proviennent d'une infinité de diffusions sur une même impureté. Par conséquent, seuls des spectres d'absorption à raie unique sont obtenus comme le montre le graphe de la figure III.16. Ces courbes sont les résultats du calcul du spectre d'absorption de la figure III.14 mais par le modèle NEGF réalisé par Wacker *et al.*. Néanmoins, le traitement auto-cohérent complet de ce modèle apporte une bonne description de l'affinement de la raie à $z_l = 8.45$ nm et les tendances des décalages des raies par rapport à l'énergie non perturbée sont correctement reproduits.

La diagonalisation exacte et le formalisme NEGF prédisent tous deux des raies d'absorption très fines lorsque les amplitudes des fonctions d'onde de l'état initial et final pour le mouvement suivant z sont approximativement les mêmes à la position du plan de dopage $z = z_l$. Une ingénierie de dopage peut alors être réalisée pour ajuster précisément d'une part la largeur mais aussi la forme de la (des) raie(s) d'absorption. Notons que des comportements et des résultats similaires sont attendus pour les spectres d'émission de la structure. La comparaison entre le modèle numérique exact et le modèle NEGF illustre encore une fois que seul un traitement du désordre

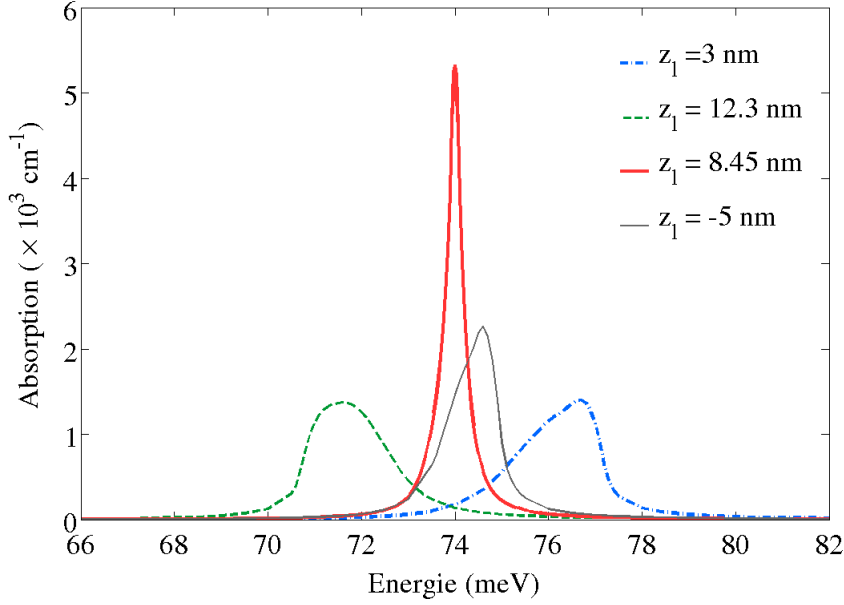


FIGURE III.16 – Spectres d'absorption pour la transition $E_1 - E_2$ calculés à partir du modèle du formalisme des fonctions de Green-Keldysh par Wacker *et al.* (modèle NEGF). Le terme de désordre V_{dis} dans H correspond au potentiel coulombien attractif écranté créé par la distribution de 8 impuretés ionisées sur le plan $z_l = 3$ nm (pointillé bleu), $z_l = 12.3$ nm (pointillé vert), $z_l = 8.45$ nm (continu rouge) et $z_l = -5$ nm (continu gris). $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $E_2 - E_1 = 73.8 \text{ meV}$. $T = 100 \text{ K}$.

à tous les ordres peut prédire l'existence des états liés et quasi-liés et *a fortiori* de rendre compte des spectres d'absorption inter-sousbande à raies multiples.

III.5.3 Cas des structures térahertz

En section III.4.2, nous avons étudié en détail le rôle et la contribution à l'absorption hors résonance de chaque type de couplage au désordre (couplage intra- ou inter-sousbande). Nous avons également évoqué que le rôle de chacun de ces couplages, bien que clairement défini dans le cas d'une structure où $E_2 - E_1 > E_{\text{lias}}$, semble moins bien établi dans le cas d'une structure à faible séparation d'énergie inter-sousbande ou bien dans le cas d'un LCQ sous champ magnétique pour lequel l'échelle de la quantification de Landau est supérieure à l'espacement inter-sousbande [126–129]. Compte tenu des énergies de liaison produites par le potentiel des impuretés écrantées ($E_{\text{lias}} \approx 8 \text{ meV}$), ce régime où $E_2 - E_1 \sim E_{\text{lias}}$ est facilement atteignable en présence d'un plan de dopage dans la structure. Sur la figure III.17, nous présentons le spectre d'absorption de notre structure considérée jusqu'à présent (graphe a) et celle de la structure de double puits quantique 9.5/3/8.5 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75} où $E_2 - E_1 = 7.3 \text{ meV}$ (graphe b). Un plan de dopage a été introduit à la position qui coïncide avec le maximum de la fonction $|\chi_2|^2$ et la concentration de donneurs est toujours de $2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Ces calculs ont été effectués en incluant soit tous les termes de diffusion ($V_{\text{imp}}^{\text{intra}}$ et $V_{\text{imp}}^{\text{inter}}$ dans le Hamiltonien H), soit uniquement les termes de couplage intra-sousbande ($V_{\text{imp}}^{\text{intra}}$ dans H uniquement).

D'après les comparaisons obtenues sur cette figure, il est clair que négliger les couplages inter-sousbande ($V_{\text{imp}}^{\text{inter}} \approx 0$) dans le Hamiltonien est une approximation

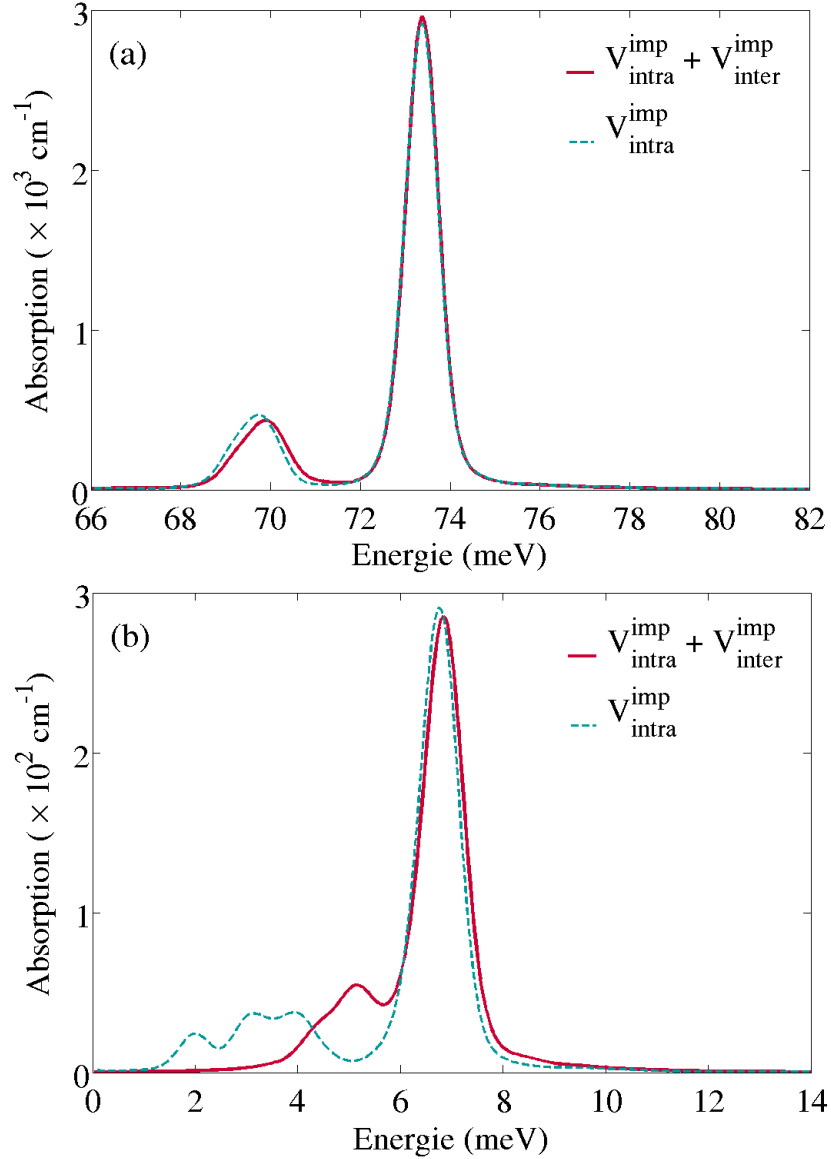


FIGURE III.17 – Spectres d’absorption pour la transition $E_1 - E_2$ calculés par diagonalisation numérique du Hamiltonien H complet (continu rouge) ou en incluant dans H uniquement les termes de couplage intra-sousbande (pointillé vert) pour deux structures de double puits quantique GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75} différentes : (a) structure 9/2/3 nm, $E_2 - E_1 = 73.8$ meV ; (b) structure 9.5/3/8.5 nm, $E_2 - E_1 = 7.1$ meV. Le terme de désordre V_{dis} dans H correspond au potentiel coulombien attractif écranté créé par la distribution de 8 impuretés ionisées sur le plan placé au maximum de la fonction enveloppe χ_2^2 . $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $T = 100$ K. 50 configurations aléatoires de donneurs.

correcte et valide dans le cas d’une structure à grande séparation $E_2 - E_1$ devant les énergies de liaison. En revanche, cette approximation donne une description très pauvre de la forme de raie d’absorption dans le cas où $E_2 - E_1 \approx E_{\text{lias}}$ [54]. La contribution importante des diffusions inter-sousbande est une caractéristique des LCQ THz qui contraste fortement avec les autres hétérostructures conventionnelles et celle-ci devrait en principe être prise en compte dans la modélisation de ces dispositifs.

III.6 Quasi-règles de sélection optiques

Afin de compléter notre étude de la largeur et de la forme de raie d'absorption, nous concluons ce chapitre par une étude de la nature même des transitions optiques qui contribuent au spectre. Plusieurs approches, telles que le formalisme des fonctions de Green [115], de la matrice densité [95] ou encore la résolution de l'équation de Boltzmann ont bien établi que la grandeur pertinente pour l'estimation de l'élargissement des transitions optiques impliquait les éléments de matrice de désordre entre les deux états dipolairement connectés. En absence de désordre, les règles de sélection optiques qui découlent de l'invariance par translation dans le plan (x, y) imposent [58] :

$$\langle n\vec{k}|p_z|n'\vec{k}'\rangle = (1 - \delta_{nn'})\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\langle n|p_z|n'\rangle \quad (\text{III.59})$$

Dans une structure réelle, deux états connectés par le photon sont eux mêmes perturbés par le désordre, entraînant ainsi une dépendance du couplage dipolaire par rapport au couplage de diffusion. Il est alors intéressant d'étudier l'effet direct du désordre sur cet élément de matrice dipolaire dans le cas des deux diffuseurs élastiques considérés jusqu'à présent dans ce chapitre.

Le cas des défauts d'interface est particulier puisque le potentiel de diffusion correspondant peut être écrit sous la forme :

$$V_{\text{def}}(\vec{r}) = f(z)g_{\text{def}}(\vec{\rho}) \quad (\text{III.60})$$

où les dépendances par rapport aux variables z et $\vec{\rho}$ sont séparées. Par identification à l'expression (I.28), g_{def} est la superposition des fonctions gaussiennes centrées aux positions des défauts $\vec{\rho}_j$ et $f(z)$ conduit au terme d'intégrale en z aux interfaces. A partir de la notation (III.60) et en ne tenant pas compte du mélange d'états des deux différentes sous-bandes, l'équation aux valeurs propres que nous résolvons par diagonalisation numérique de H devient :

$$\sum_{\vec{k}} \varphi_{n\nu}(\vec{k}) \left[\left(\frac{\varepsilon_\nu}{f_n} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^* f_n} \right) \delta_{\vec{k}\vec{k}'} + \langle \vec{k}'|g_{\text{def}}|\vec{k}\rangle \right] = 0 \quad (\text{III.61})$$

où nous définissons le coefficient $f_n = \langle n|f(z)|n\rangle$ qui exprime la force du couplage au désordre d'interface. Ce résultat est uniquement valable en absence de couplage inter-sousbande au désordre mais comme noté en section III.4.2, ceci reste probablement une bonne approximation au voisinage de la résonance. Il apparait donc que cette équation ne diffère que du facteur f_n d'une sous-bande à l'autre puisque les fonctions d'onde dans le plan (x, y) sont quasi-identiques pour les deux sous-bandes. Ce résultat est une généralisation de ce qui a déjà été démontré dans le régime des forts champs magnétiques [101].

La figure III.18.a donne la valeur de l'élément de matrice dipolaire $\langle \nu|p_z|\mu\rangle$ pour tous les couplages possibles entre états du système. Ce graphe présente deux bandes élargies distinctes autour des énergies de transition $|\varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu| \approx E_2 - E_1 = 73.8$ meV. Cette énergie correspond à l'espacement inter-sousbande de la structure idéale. En absence de désordre, aucun élargissement n'apparaîtrait puisqu'un état final donné ne peut être dipolairement connecté qu'à un seul et unique état initial, celui qui a le même vecteur d'onde \vec{k} , d'après l'expression (III.59). Le fait que l'élément de matrice dipolaire soit quasi-nul pour des couples d'états dont la différence d'énergie diffère

fortement de la séparation $E_2 - E_1$ est la signature de l'existence de quasi-règles de sélection optiques. La largeur des bandes de transition dipolaire dépend en effet du rapport f_2/f_1 : si celui-ci est proche de 1 alors aucun élargissement n'est attendu. Néanmoins, ce cas reste purement théorique car, contrairement aux impuretés localisées sur un plan quelconque de la structure, le fait d'avoir $\chi_n(z_0) \approx \chi_{n'}(z_0)$ ne peut jamais se produire en présence de désordre d'interface car la pénétration des fonctions enveloppe dans les barrières augmente avec l'indice de sous-bande.

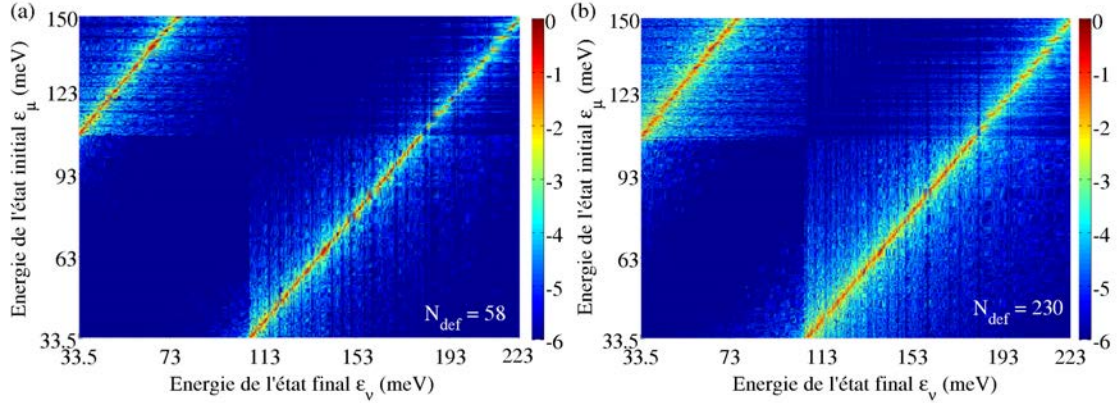


FIGURE III.18 – Élément dipolaire normalisé pour l'ensemble des transitions $\varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu$ (logarithme décimal de l'élément dipolaire). Le terme de désordre V_{dis} dans H correspond au potentiel de désordre d'interface caractérisé par les paramètres $N_{\text{def}} = 58$ (a) ou $N_{\text{def}} = 230$ (b), $h_{\text{def}} = 2.83 \text{ \AA}$ et $\sigma = 3.6 \text{ nm}$. $N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = N_{\text{def}}/2$. $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $E_2 - E_1 = 73.8 \text{ meV}$. Moyenne sur 50 configurations aléatoires de désordre.

D'autres paramètres, notamment ceux qui contrôlent l'efficacité de la diffusion, affectent également la largeur des zones où l'élément de matrice dipolaire est le plus intense. La figure III.18.b montre le même graphe que la figure III.18.a mais pour un nombre supérieur de défauts. Un élargissement de ces zones se distingue. Notons qu'une augmentation de la hauteur des défauts h_{def} aurait un effet similaire.

Le potentiel de désordre d'interface est un potentiel à courte portée, générant des états liés peu profonds et dont les dépendances en z et $\vec{\rho}$ sont séparables. Mais tel n'est pas le cas du potentiel coulombien (écranté ou non). Cependant, nous avons démontré en section III.5.2 qu'en présence d'une concentration diluée de donneurs au plan z_l , le potentiel coulombien à courte portée est identique pour les deux sous-bandes si leurs densités de probabilité de présence électronique respectives sont égales. Dans une telle circonstance, nous devrions ici aussi nous attendre à l'émergence de quasi-règles de sélection optiques, analogues au cas des défauts d'interface.

Par analogie à la figure III.18, la figure III.19 donne les valeurs de l'élément de matrice dipolaire entre tous les états perturbés par la présence des impuretés ionisées. Les graphes montrent des effets similaires à ceux obtenus pour les défauts, effets qui attestent, dans ce cas aussi, l'existence de quasi-règles de sélection optiques rémanentes. La même tendance d'élargissement est observée à mesure que le nombre d'impuretés augmente.

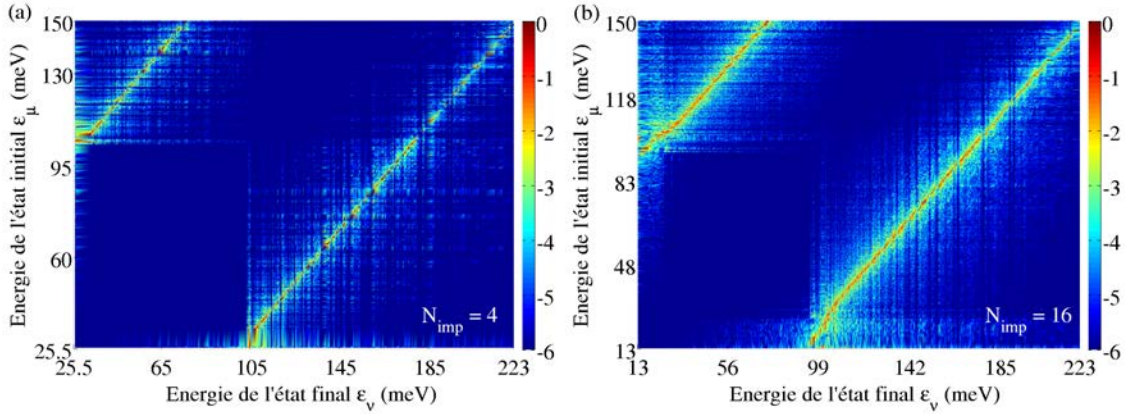


FIGURE III.19 – Élément dipolaire normalisé pour l'ensemble des transitions $\varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu$ (logarithme décimal de l'élément dipolaire). Le terme de désordre V_{dis} dans H correspond au potentiel coulombien écranté créé par la distribution de N_{imp} impuretés ionisées sur le plan $z_l = 3$ nm. $N_{\text{imp}} = 4$ (a) ou $N_{\text{imp}} = 16$ (b), $h_{\text{def}} = 2.83$ Å et $\sigma = 3.6$ nm. $n_e = 2.17 \times 10^{10}$ cm $^{-2}$. $E_2 - E_1 = 73.8$ meV. Moyenne sur 50 configurations aléatoires d'impuretés.

De plus, dans la section III.5.2, nous avons noté l'écart significatif entre les largeurs des fonctions spectrales et celles des raies d'absorption. La figure III.20 présente les valeurs de l'élément de matrice dipolaire dans les quatre cas étudiés (relatifs aux quatre différentes positions z_l du plan de dopage). Des allures similaires aux graphes précédents sont de nouveau obtenues ici et démontrent bien l'existence de quasi-règles de sélection optiques qui contrôlent efficacement la largeur de la raie d'absorption et ceci, malgré un fort mélange des états attesté par la largeur des fonctions spectrales.

Les résultats de cette étude de la nature des transitions optiques et des paramètres affectant le couplage dipolaire restent bien en accord avec la représentation conventionnelle d'élargissement des états mais contiennent également un aspect important qui est celui de l'ajustabilité de la largeur de la raie d'absorption inter-sousbande [76].

III.7 Conclusion

Ce troisième chapitre a présenté une étude de la forme et de la largeur de raie d'absorption inter-sousbande dans les hétérostructures quasi-bidimensionnelles de type LCQ. Dans le but de calculer l'absorption de la structure à tous les ordres de diffusion, nous avons développé une approche numérique de diagonalisation numérique du Hamiltonien en présence de désordre. Deux types de diffuseurs statiques ont été pris en compte : la rugosité d'interface, intrinsèque à la structure, et les impuretés ionisées (écrantées) introduites par le dopage.

Dans la première partie, consacrée à l'étude de l'absorption en présence des défauts d'interface, nous avons dans un premier temps comparé notre calcul numérique exact au modèle perturbatif exposé au chapitre II. Cette comparaison a démontré la

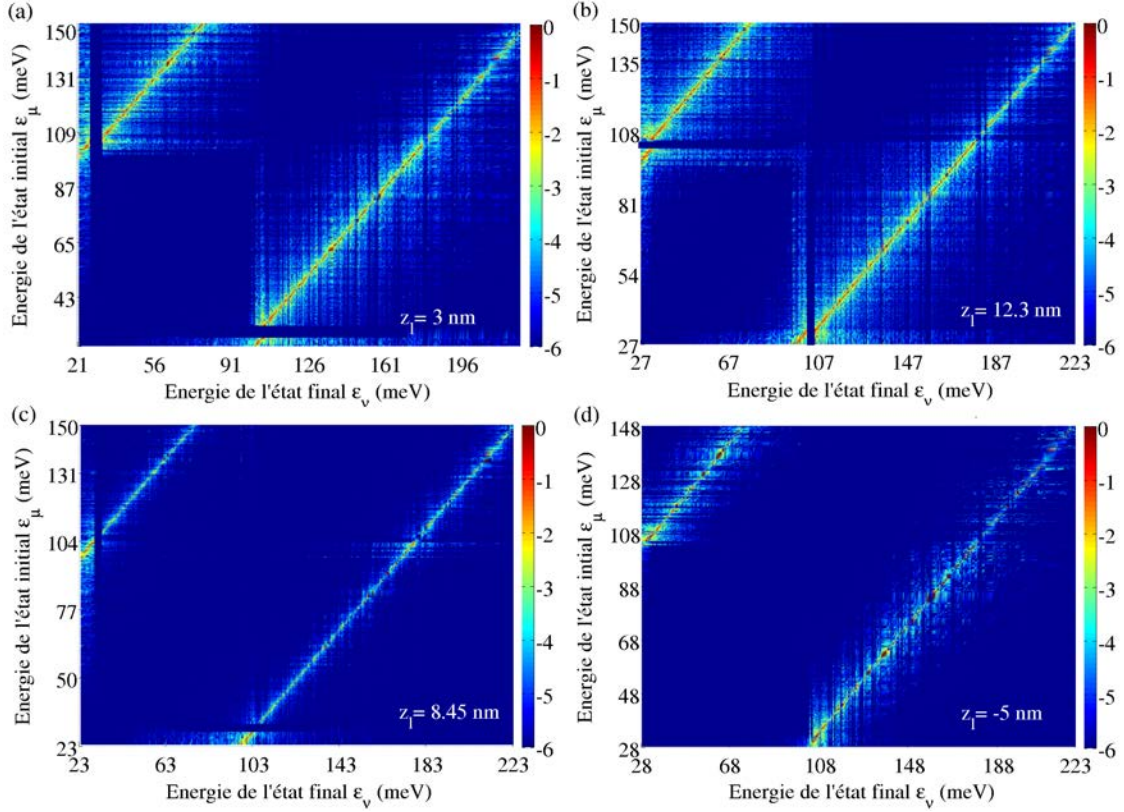


FIGURE III.20 – Élément dipolaire normalisé pour l'ensemble des transitions $\varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu$ (logarithme décimal de l'élément dipolaire). Le terme de désordre V_{dis} dans H correspond au potentiel coulombien écranté créé par la distribution de 8 impuretés ionisées sur le plan $z_l = 3$ nm (a), $z_l = 12.3$ nm (b), $z_l = 8.45$ nm (c) et $z_l = -5$ nm (d). $n_e = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $E_2 - E_1 = 73.8$ meV. Moyenne sur 50 configurations aléatoires d'impuretés.

validité de notre approche perturbative pour l'estimation de l'absorption hors résonance, là où les pertes par porteurs libres dominent. De plus, nous avons identifié les contributions au spectre d'absorption relatives aux couplages intra- et inter-sousbande de diffusion. La diffusion intra-sousbande domine le pic de résonance et l'aile de haute énergie alors que les diffusions inter-sousbande dominent l'aile de basse énergie du spectre d'absorption. Dans un second temps, nous avons comparé nos résultats numériques à ceux obtenus par d'autres modèles d'absorption fréquemment utilisés. Cette comparaison a mis en évidence les limites de ces approches, essentiellement basées sur les fonctions de corrélation. Tandis que la raie d'absorption centrale est parfaitement bien décrite par le modèle d'Unuma *et al.* et le formalisme des fonctions de Keldysh-Green de Wacker *et al.*, les ailes d'absorption sont systématiquement surestimées à cause de l'emploi de l'approximation de Born. Par ailleurs, une étude détaillée du spectre d'énergie de la structure a mis en évidence la présence d'états liés et quasi-liés en-dessous des minima de sous-bande. Ces états ne peuvent être prédits et calculés que par une approche exacte, prenant en compte les termes de couplage à diffusions multiples.

La seconde partie de ce chapitre était consacrée au cas des impuretés ionisées. Nous avons montré qu'une ingénierie de dopage dans les hétérostructures conduisait à des situations intéressantes. Premièrement, notre approche numérique confirme qu'il est

possible d'obtenir une unique raie fine d'absorption malgré la présence d'un fort élargissement des états de sous-bande. Cet affinement de la raie a été obtenu par diagonalisation numérique mais aussi par les techniques de fonctions de Green. Malgré cela, il est impératif de garder en tête que l'approximation de Born ne peut pas reproduire les états liés aux impuretés et par conséquent, le cas de figure de la double raie d'absorption obtenu dès lors qu'un des deux états est plus affecté que l'autre par le désordre. Si le plan de dopage est placé dans la structure d'une manière qui n'assure pas des amplitudes de fonctions d'onde égale, l'absorption inter-sousbande présente en règle générale deux raies d'absorption. Il en serait de même pour l'émission qui est le processus inverse (seuls les facteurs de population sont inversés). L'existence de deux raies modifie le profil d'absorption de manière significative et est donc essentielle à une description réaliste des dispositifs faiblement dopés tels que les LCQ THz.

Enfin, notre étude de la nature des transitions optiques a conduit à la démonstration de l'existence de quasi-règles de sélection optiques rémanentes, malgré la brisure de l'invariance par translation par le désordre. Il apparaît que celles-ci contrôlent efficacement la largeur des raies d'absorption. Leur efficacité est par ailleurs affectée par l'efficacité de diffusion : la prise en compte d'un nombre de diffuseurs plus important, par exemple, conduira à des règles de sélection moins strictes et donc, à un élargissement de la raie d'absorption. Ces tendances sont bien en accord avec la représentation conventionnelle de l'élargissement des transitions optiques entre états de conduction élargis par le désordre.

Chapitre IV

Fuite des porteurs, taux de diffusion non radiative

IV.1 Introduction

Au cours des chapitres II et III, nous nous sommes intéressée au phénomène d'absorption par porteurs libres dans les LCQ, impliquant d'une part le photon laser initialement émis et d'autre part un diffuseur de la structure. Nous y avons présenté une étude quantitative complète de ce mécanisme du second ordre ainsi qu'une analyse détaillée de la forme et de la largeur de la raie d'absorption. Néanmoins, un autre effet limitant fortement l'émission laser dans les LCQ mérite d'être traité. Il s'agit du processus non radiatif de diffusion inter-sousbande au cours duquel un électron situé initialement sur la sous-bande supérieure de la transition laser est élastiquement ou inélastiquement diffusé vers une autre sous-bande et par conséquent, n'émet pas le photon requis [62, 99, 113].

Rappelons qu'en règle générale, la quantification des états d'énergie en sous-bande dans les hétérostructures quasi-bidimensionnelles implique l'existence de deux types de mécanisme de diffusion des électrons : les diffusions intra-sousbande au cours desquelles la localisation en z reste constante, et les diffusions inter-sousbande pour lesquelles celle-ci varie. Les processus de diffusion inter-sousbande sont moins efficaces que les processus intra-sousbande, en particulier pour les structures à multipuits quantiques asymétriques, puisque les positions moyennes z de l'état initial et de l'état final de diffusion sont différentes [100]. Comme pour l'absorption par porteurs libres, les sources de diffusion sont nombreuses : les diffuseurs élastiques les plus efficaces restent les défauts d'interface et les impuretés ionisées introduites par le dopage de la structure. L'émission et l'absorption de phonons LO dominant quant à elles les processus inélastiques. Les taux de diffusion de ces différents mécanismes sont généralement évalués à l'approximation de Born, en faisant l'hypothèse que les états initiaux et finaux de la transition sont des états d'onde plane par définition délocalisés dans le plan des couches.

Dans ce quatrième chapitre, nous montrerons que l'estimation de ces taux de diffusion par cette méthode est une approximation qui ne peut être valable qu'à de hautes températures pour lesquelles l'occupation statistique de la sous-bande inférieure de la transition concerne principalement les états véritablement délocalisés, c'est-à-dire ayant une énergie cinétique bien supérieure à l'échelle des fluctuations

du potentiel de diffusion [130]. Nous montrerons en particulier que cette non-validité est directement liée au fait que l'électron effectue un certain nombre de diffusions intra-sousbande avant d'être diffusé vers une autre sous-bande. Ou bien, en d'autres termes, que les états propres de basse énergie du Hamiltonien intra-sousbande sont fortement localisés [131] dans le plan des couches par le désordre. Nous traiterons les cas de diffusions inter-sousbande dues aux impuretés ionisées donneuses et aux défauts d'interface. Par une diagonalisation numérique du Hamiltonien intra-sousbande analogue à celle développée au chapitre III, nous calculerons les états propres associés à chaque sous-bande impliquée dans la diffusion. Nous étudierons alors les effets de localisation (ou quasi-localisation) des états de basse énergie autour des centres diffuseurs, états non accessibles par une méthode de calcul conventionnelle reposant sur l'approximation de Born. Nous montrerons alors que ceux-ci sont responsables d'une augmentation significative des taux de diffusion. Dans un même temps, nous analyserons l'influence de la concentration et de la position des diffuseurs dans la structure sur ces processus non radiatifs. Enfin, comme au chapitre précédent, nous conclurons celui-ci en traitant le cas d'une structure pour laquelle la séparation en énergie des deux sous-bandes devient comparable à l'échelle d'énergie du potentiel diffuseur.

IV.2 Approche standard : approximation de Born

Le taux de diffusion $\gamma_{n\vec{k}}$, inversement proportionnel au temps de vie $\tau_{n\vec{k}}$ d'un électron sur un état $|n\vec{k}\rangle$, est une donnée cruciale pour la réalisation des structures à cascade quantique. Elle nous renseigne en effet sur l'élargissement des niveaux électroniques par le désordre mais aussi sur l'efficacité des processus de fuite de porteurs au cours du processus d'inversion de population. L'approche standard de calcul des taux de diffusion repose sur l'utilisation de l'approximation de Born pour laquelle les états de conduction sont considérés comme étant des états d'onde plane dans le plan des couches de croissance.

Afin de détailler cette approche largement utilisée, considérons la structure de double puits quantique asymétrique 9/3/2 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75} introduite au chapitre III et intéressons nous aux transitions inter-sousbande non radiatives $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |1\vec{k}'\rangle$ ($E_2 - E_1 = 73.8$ meV) dues aux impuretés ionisées et à la rugosité d'interface. Comme précédemment, en présence du désordre, le Hamiltonien enveloppe du système à deux sous-bandes s'écrit :

$$H = H_0 + V_{\text{dis}} = \frac{1}{2}\vec{p}\frac{1}{m^*}\vec{p} + V_b(z) + V_{\text{dis}}(\vec{\rho}, z) \quad (\text{IV.1})$$

V_{dis} est le potentiel de désordre créé soit par les défauts d'interface, soit par les impuretés ionisées (potentiel écranté [76, 120]). Dans ce chapitre, nous considérons une nouvelle fois l'expression de ces deux potentiels donnée explicitement au chapitre I (Eq. I.28) et au chapitre III (Eq. III.52) respectivement, ainsi qu'une concentration d'impuretés ionisées donneuses $n_{\text{imp}} = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, correspondant de nouveau à une distribution aléatoire de 8 impuretés sur le plan (x, y) de dimension $200 \times 200 \text{ nm}^2$ à la position z_l . A la température $T = 100 \text{ K}$, la longueur d'écrantage λ_{SC} du potentiel d'impureté est égale à 23.5 nm. Cette valeur étant significativement supérieure au rayon de Bohr effectif ($\approx 7 \text{ nm}$ dans GaAs), les impuretés sont faiblement écrantées et l'apparition d'états liés d'énergie inférieure au minimum de sous-bande est

de nouveau attendue. Nous utilisons également la même modélisation des défauts d'interface que précédemment (exposée au chapitre I). Ces derniers sont introduits sur les deux interfaces internes de la structure (à $z_0 = 9$ nm et $z_0 = 11$ nm) et les paramètres de désordre correspondants sont $\sigma = 3.6$ nm, $h_{\text{def}} = 2.83 \text{ \AA}$ et $f_{\text{def}} = 0.30$.

Rappelons qu'en absence de désordre ($V_{\text{dis}} = 0$), les solutions du Hamiltonien non perturbé H_0 sont les états d'onde plane $|n\vec{k}\rangle$ d'expression (I.3) et d'énergie $\varepsilon_{n\vec{k}} = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$. La méthode la plus simple et la plus directe d'évaluer le taux de diffusion inter-sousbande de l'état initial $|2\vec{k}\rangle$ consiste à appliquer la règle d'or de Fermi à l'approximation de Born pour le potentiel V_{dis} [100] :

$$\gamma_{2\vec{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}'} \left| \langle 2\vec{k} | V_{\text{dis}} | 1\vec{k}' \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_{2\vec{k}} - \varepsilon_{1\vec{k}'}) \quad (\text{IV.2})$$

L'évaluation de (IV.2) est analytiquement simple puisque l'élément de matrice de chaque potentiel de désordre entre deux états d'onde plane est proportionnel au facteur de forme relatif à chaque diffuseur. Ainsi, nous obtenons les éléments de matrice des potentiels coulombien écranté (V_{imp}) et de désordre d'interface (V_{def}) suivants :

$$\langle 2\vec{k} | V_{\text{imp}} | 1\vec{k}' \rangle = -\frac{e^2}{2\varepsilon_0 \varepsilon_r S} \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{\rho}_j} \int dz \chi_1(z) \chi_2(z) \frac{e^{-\sqrt{Q^2 + q_D^2} |z - z_l|}}{\sqrt{Q^2 + q_D^2}} \quad (\text{IV.3})$$

$$\langle 2\vec{k} | V_{\text{def}} | 1\vec{k}' \rangle = \frac{2\pi\sigma^2 V_b}{S} e^{-\sigma^2 Q^2/2} \sum_{z_0} \left(\tilde{u}_{12}^{\text{rep}} \sum_{j=1}^{N_{\text{rep}}} e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{\rho}_j} - \tilde{u}_{12}^{\text{att}} \sum_{j=1}^{N_{\text{att}}} e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{\rho}_j} \right) \quad (\text{IV.4})$$

où l'entier j indice les impureté ou les défauts répulsifs/attractifs respectivement. $\vec{Q} = \vec{k} - \vec{k}'$ est la différence de vecteur d'onde entre l'état final et initial. Les intégrales $\tilde{u}_{12}^{\text{att}}$ et $\tilde{u}_{12}^{\text{rep}}$ sont déjà explicitées au chapitre III (Eqs. III.27 et III.28). De nouveau, en supposant qu'il n'existe aucune corrélation entre les différents centres diffuseurs, la moyenne des modules carrés de ces éléments de matrice est proportionnelle au nombre de défauts/impuretés (resp. $N_{\text{att/rep}}$ et N_{imp}). En effectuant la somme sur les vecteurs d'onde \vec{k}' de l'état final dans (IV.2), nous obtenons, pour les donneurs, le taux de diffusion suivant :

$$\gamma_{2\vec{k}}^{\text{imp}} = \frac{e^4 m^*}{8\pi \hbar^3 [\varepsilon_0 \varepsilon_r]^2 S} N_{\text{imp}} \int_0^{2\pi} d\theta \left| \int dz \chi_1(z) \chi_2(z) \frac{e^{-\sqrt{Q^2(\theta) + q_D^2} |z - z_l|}}{\sqrt{Q^2(\theta) + q_D^2}} \right|^2 \quad (\text{IV.5})$$

et pour les défauts d'interface :

$$\gamma_{2\vec{k}}^{\text{def}} = \frac{2\pi\sigma^4 V_b^2 m^*}{\hbar^3 S} \sum_{z_0} (N_{\text{att}} |\tilde{u}_{12}^{\text{att}}|^2 + N_{\text{rep}} |\tilde{u}_{12}^{\text{rep}}|^2) \int_0^{2\pi} d\theta e^{-\sigma^2 Q^2(\theta)} \quad (\text{IV.6})$$

avec $Q^2(\theta) = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta$ où $\theta = (\vec{k}, \vec{k}')$ et où par conservation de l'énergie : $k'^2 = k^2 + \frac{2m^*}{\hbar^2} (E_2 - E_1)$. Les expressions (IV.5) et (IV.6) rendent compte d'une dépendance linéaire en fonction du nombre de diffuseurs mais aussi, à travers les facteurs de forme, d'une dépendance en fonction du recouvrement des fonctions d'onde χ_1 et χ_2 (soit au plan de dopage z_l , soit aux interface rugueuses z_0 , comme

c'était déjà le cas pour l'absorption par porteurs libres). Il est intéressant de noter que dans le cas d'une diffusion intra-sousbande $|2\vec{k}\rangle \rightarrow |2\vec{k}'\rangle$, ces facteurs de forme contiennent non plus le recouvrement $\chi_1\chi_2$ mais plutôt le module carré de la fonction χ_2 . Ainsi, dès lors que $\int dz\chi_1(z)\chi_2(z) < \int dz|\chi_2(z)|^2$, il est immédiat de constater que les processus intra-sousbande sont ceux qui possèdent un taux de diffusion plus important et par conséquent, sont les plus efficaces. Néanmoins, certes simple et directe à implémenter, reste insatisfaisante. En effet, les expressions (IV.2) à (IV.6) ne tiennent pas compte du fait qu'une transition inter-sousbande est un événement relativement rare comparé à une transition intra-sousbande. Autrement dit, l'électron diffusé par le désordre subit un certain nombre de diffusions intra-sousbande avant de sortir de sa sous-bande initiale E_2 . Pour tenir compte de cet effet, il est alors nécessaire de connaître les états *réels* de chaque sous-bande, c'est-à-dire les états contenant également l'effet des couplages au désordre intra-sousbande. La figure IV.1 montre schématiquement les différents types de diffusion élastiques que nous traiterons dans la suite.

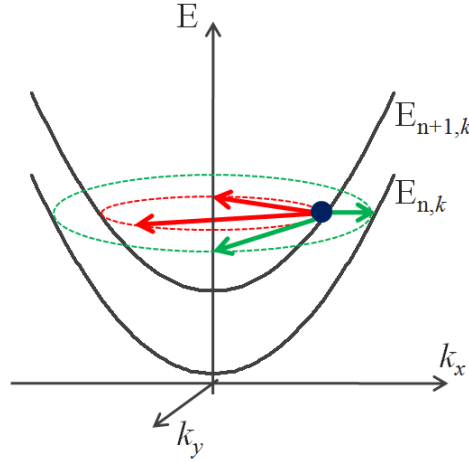


FIGURE IV.1 – Schéma des processus de diffusion élastique non radiative intra-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |n\vec{k}'\rangle$ (flèches rouges) et inter-sousbande $|n\vec{k}\rangle \rightarrow |n\vec{k}'\rangle$ (flèches vertes). Le point bleu représente l'état initial en sous-bande E_{n+1} . Les processus de diffusion intra-sousbande sont plus efficaces que les processus inter-sousbande puisque pour ces derniers, la localisation en z est modifiée. Par conséquent, avant d'être diffusé dans la sous-bande E_n , l'électron subit un certain nombre de diffusions intra- E_{n+1} . Cette différence d'efficacité de diffusion est particulièrement notable dans les structures à multi-puits quantiques asymétriques tels que les LCQ.

IV.3 Approche numérique exacte

Le calcul des états réels de la structure passe une nouvelle fois par une diagonalisation numérique du Hamiltonien en présence de désordre¹. En considérant que le processus inter-sousbande reste une petite perturbation, nous utilisons les projecteurs P_1 et P_2 sur les sous-espaces associés respectivement aux états de sous-bande E_1 et E_2 pour réécrire le Hamiltonien complet H de (IV.1) sous la forme :

$$H = H_1 + H_2 + P_1 V_{\text{dis}} P_2 + P_2 V_{\text{dis}} P_1 \quad (\text{IV.7})$$

1. Les calculs relatifs aux impuretés ionisées sont effectués dans le régime d'écrantage de Debye-Hückel comme au chapitre III.

où $H_i = P_i H_0 P_i + P_i V_{\text{dis}} P_i$, $i = 1, 2$ sont les réductions du Hamiltonien complet H dans les sous-espaces de E_1 et E_2 . Les projections des fonctions d'onde $P_i |\Psi_i\rangle$ vérifient alors :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (P_1 |\Psi\rangle) = H P_1 |\Psi\rangle + P_1 V_{\text{dis}} P_2 |\Psi\rangle \quad (\text{IV.8})$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (P_2 |\Psi\rangle) = H P_2 |\Psi\rangle + P_2 V_{\text{dis}} P_1 |\Psi\rangle \quad (\text{IV.9})$$

Pour une configuration aléatoire de désordre V_{dis} donnée, la règle d'or de Fermi peut alors être appliquée pour calculer le taux de diffusion inter-sousbande à l'ordre le plus bas en $P_1 V_{\text{dis}} P_2$. Ainsi, on désigne les états propres de H_1 et H_2 par $|1\nu\rangle$ et $|2\mu\rangle$ respectivement :

$$\begin{aligned} |1\nu\rangle &= \frac{1}{S} \sum_i c_{1\nu}(\vec{k}_i) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{\rho}} \chi_1(z) \\ |2\mu\rangle &= \frac{1}{S} \sum_i c_{2\mu}(\vec{k}_i) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{\rho}} \chi_2(z) \end{aligned} \quad (\text{IV.10})$$

où les vecteurs \vec{k}_i sont les vecteurs d'onde de la base numérique et où les coefficients complexes $c_{1\nu}$ et $c_{2\mu}$ sont les vecteurs propres normalisés de $H_{1,2}$. Le calcul des états propres $|1\nu\rangle$ et $|2\mu\rangle$ se fait par diagonalisation numérique des Hamiltoniens H_1 et H_2 développés dans la base d'ondes planes périodiques déjà utilisée au chapitre III mais cette fois-ci, réduite à une seule sous-bande. A partir de ces états numériques, nous obtenons l'expression du taux de diffusion $|2\mu\rangle \rightarrow |1\nu\rangle$ suivante, analogue à l'expression (IV.2) :

$$\gamma_{2\mu} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\nu} |\langle 2\mu | V_{\text{dis}} | 1\nu \rangle|^2 \delta(\varepsilon_{2\mu} - \varepsilon_{1\nu}) \quad (\text{IV.11})$$

Par ailleurs, au même titre que les spectres d'absorption présentés au chapitre III sont issus d'une moyenne sur N configurations aléatoires de désordre, le calcul de γ donné par (IV.11) est répété pour N configurations aléatoires de défauts/impuretés. Un taux de diffusion moyen $\langle \gamma_{2\mu} \rangle$ est alors obtenu en fonction de l'énergie propre de H_2 : $\varepsilon_{2\mu} = E_2 + \varepsilon_{\mu}$ où la contribution ε_{μ} peut être positive ou négative suivant que l'état propre $\varepsilon_{2\mu}$ est un état libre ou lié à un diffuseur. Dû à la discrétisation numérique de l'espace des vecteurs d'onde, ces calculs donnent des valeurs de $\gamma_{2\mu}$ fortement discrétisées. Afin de lisser le "bruit numérique" qui en résulte, les valeurs de $\gamma_{2\mu}$ sont convoluées par une fonction gaussienne centrée à l'énergie $\varepsilon_{2\mu}$ et de largeur à mi-hauteur $\sigma_G = 1.1$ meV.

IV.4 Localisation spatiale induite par le désordre

Rappelons que, contrairement au cas idéal $V_{\text{dis}} = 0$ pour lequel les indices μ et ν des états propres coïncident avec le nombre quantique \vec{k} des états d'onde plane, en présence de désordre, le spectre des valeurs propres $\varepsilon_{1\nu}$ et $\varepsilon_{2\mu}$ comprend deux types d'état : les états discrets et localisés à basse énergie et les états libres et étendus de haute énergie. En présence d'impuretés ionisées par exemple, nous avons vu au chapitre III que les états liés ont des énergies bien inférieures au minimum de sous-bande $E_{1,2}$. Le désordre d'interface quant à lui lie faiblement les états en raison de la

faible profondeur et le court rayon d'action des défauts. Outre cette caractéristique portant sur l'énergie de ces états liés, intéressons nous désormais plus en détail à leur localisation spatiale.

Par analogie à la figure III.5 La figure IV.2 présente la densité de probabilité électronique d'un état propre initial $|2\mu\rangle$ donnée par :

$$|\Phi_{2\mu}(x, y)|^2 \propto \left| \sum_i c_{2\mu}(\vec{k}_i) (e^{ik_{ix}x} + e^{ik_{iy}y}) \right|^2 \quad (\text{IV.12})$$

Sur la figure IV.2, cette densité de probabilité est normalisée à sa valeur maximum Φ_0 . Pour les deux types de diffuseurs pris en considération dans ce chapitre, quatre états d'énergie sont représentés : $\varepsilon_{2\mu} = E_2 - 4$ meV et $\varepsilon_{2\mu} = E_2 - 1$ meV sont respectivement deux états liés en présence des impuretés et des défauts d'interface, $\varepsilon_{2\mu} = E_2$ est exactement au niveau du bas de sous-bande, $\varepsilon_{2\mu} = E_2 + 3$ meV est un état au-dessus du bas de sous-bande mais dont l'écart en énergie avec E_2 reste comparable à l'échelle d'énergie des potentiels diffuseurs effectifs. Et enfin, $\varepsilon_{2\mu} = E_2 + 12$ meV est un état libre d'énergie bien supérieure à celle des potentiels diffuseurs.

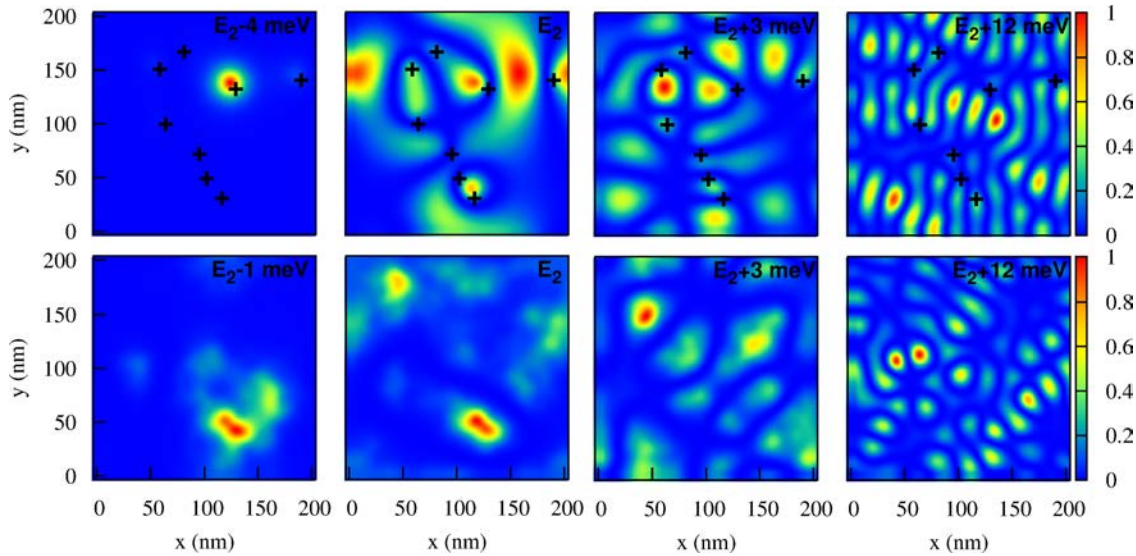


FIGURE IV.2 – Densités de probabilité électronique normalisées pour différentes énergies propres du Hamiltonien intra-sousbande H_2 .

Panneaux supérieurs : les énergies sont respectivement $E_2 - 4$ meV, E_2 , $E_2 + 3$ meV et $E_2 + 12$ meV. Le terme de désordre dans H_2 correspond au potentiel coulombien attractif créé par la distribution de 8 impuretés ionisées ($n_{\text{imp}} = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$) aléatoirement réparties sur le plan $z_l = 3$ nm. Chaque position d'impureté est repérée dans le plan (x, y) par une croix.

Panneaux inférieurs : les énergies sont respectivement $E_2 - 1$ meV, E_2 , $E_2 + 3$ meV et $E_2 + 12$ meV. Le terme de désordre V_{dis} correspond au potentiel de désordre d'interface caractérisé par les paramètres $f_{\text{def}} = 0.3$, $h_{\text{def}} = 2.83$ Å et $\sigma = 3.6$ nm. $N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = N_{\text{def}}/2$. Chaque interface contient au total 172 défauts.

Structure 9/3/2 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75}.

Les graphes de la partie supérieure montrent les variations de $\Phi_{2\mu}(x, y)/\Phi_0$ en présence d'impuretés ionisées. Le plan de dopage est situé à $z_l = 3$ nm dans la struc-

ture de double puits quantique (voir figure III.12) et chaque position d'impureté est repérée par une croix sur la figure. Ces différents graphes confirment bien l'existence d'effets importants de localisation spatiale par les diffuseurs. Les états de basse énergie ont très peu de similitudes avec des états d'onde plane idéaux considérés par l'approche standard à l'approximation de Born. Au contraire, ceux-ci présentent plutôt une forte localisation autour des centres d'impureté. Les états de haute énergie quant à eux sont quasi-étendus et tendent vers une délocalisation d'onde plane de même énergie.

Le graphes de la partie inférieure de la figure IV.2 montrent des résultats similaires obtenus en présence des défauts d'interface. On constate une analogie qualitative avec les états d'impureté mais les effets de localisation restent, comme attendu, quantitativement plus faibles et moins prononcés en raison de la faible profondeur de ces diffuseurs. Enfin, cette figure atteste bien d'effets de localisation croissants avec l'énergie de l'état : plus l'état propre est haut en énergie, plus le nombre quantique μ tend vers le nombre quantique \vec{k} car son énergie cinétique ε_μ devient grande devant l'énergie de liaison du potentiel diffuseur.

Des résultats similaires sont obtenus pour les états propres de H_1 mais avec des énergies de liaison aux impuretés plus importantes dues à la position particulière du plan de dopage². Compte tenu de ces premiers résultats et de la valeur $E_2 - E_1 = 73.8$ meV, une différence d'énergie bien supérieure aux fluctuations typiques des potentiels de désordre considérés, le calcul de l'expression (IV.11) peut être simplifié en remplaçant l'état final $|1\nu\rangle$ par un état d'onde plane $|1\vec{k}'\rangle$ de même énergie. En effet, les diffusions par impuretés et par défauts étant des transitions élastiques, la conservation de l'énergie impose que le plus bas état d'énergie accessible par l'électron transitant de la sous-bande E_2 vers la sous-bande E_1 soit celui d'énergie $\varepsilon_{1\nu} = E_1 + \varepsilon_\nu$ où $\varepsilon_\nu = E_2 - E_{\text{lias}}$, avec E_{lias} l'énergie de liaison du plus profond état lié. Cette énergie ε_ν étant bien supérieure à E_{lias} , l'état d'énergie correspondant appartient bien au groupe des états quasi-étendus dont le nombre quantique ν coïncide avec \vec{k}' . Suivant cette considération, le taux de diffusion $|2\mu\rangle \rightarrow |1\vec{k}'\rangle$ par le potentiel V_{dis} est donné par :

$$\gamma_{2\mu} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}'} \left| \langle 2\mu | V_{\text{dis}} | 1\vec{k}' \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_{2\mu} - \varepsilon_{1\vec{k}'}) \quad (\text{IV.13})$$

Ainsi la sommation sur les vecteurs d'onde \vec{k}' est analytique et mène aux expressions de $\gamma_{2\mu}$ pour chaque type de diffuseur :

$$\begin{aligned} \gamma_{2\mu}^{\text{imp}} = \frac{e^4 m^*}{8\pi(\varepsilon_0 \varepsilon_r)^2 \hbar^3 S} \int_0^{2\pi} d\theta \left| \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \sum_i e^{i\vec{Q}_i(\theta) \cdot \vec{\rho}_j} c_{2\mu}^*(\vec{k}_i) \right. \\ \left. \times \int dz \chi_1(z) \chi_2(z) \frac{e^{-\sqrt{Q_i^2(\theta) + q_D^2} |z - z_l|}}{\sqrt{Q_i^2(\theta) + q_D^2}} \right|^2 \end{aligned} \quad (\text{IV.14})$$

2. Comme il a été montré au chapitre III, la position du plan d'impureté $z_l = 3$ nm correspond à une position z pour laquelle $\chi_1^2(z_l) > \chi_2^2(z_l)$, les états de E_1 sont alors plus affectés par le potentiel coulombien.

$$\gamma_{2\mu}^{\text{def}} = \frac{2\pi\sigma^4 V_b^2 m^*}{\hbar^3 S} \int_0^{2\pi} d\theta \left| \sum_i c_{2\mu}^*(\vec{k}_i) e^{-\sigma^2 Q_i^2(\theta)/2} \right. \\ \left. \times \sum_{z_0} \left(\sum_{j=1}^{N_{\text{rep}}} e^{i\vec{Q}_i(\theta) \cdot \vec{\rho}_j} u_{12}^{\text{rep}} - \sum_{j'=1}^{N_{\text{att}}} e^{i\vec{Q}_i(\theta) \cdot \vec{\rho}_{j'}} u_{12}^{\text{att}} \right) \right|^2 \quad (\text{IV.15})$$

où : $\vec{Q}_i = \vec{k}_i - \vec{k}'$. Notons que les sommes sur les indices “ j ” de diffuseurs doivent cette fois-ci être calculées numériquement à cause de la somme supplémentaire sur les états de base i . Aucune moyenne analytique sur les positions aléatoires des diffuseurs n’est désormais possible.

IV.5 Influence des paramètres de désordre

A partir des expressions (IV.14) et (IV.15), nous calculons numériquement le taux de diffusion $\gamma_{2\mu}$ en fonction des différents paramètres du problème tels que le type de diffuseur impliqué, la concentration de diffuseurs ou encore leur position dans la structure. Dans la suite de ce chapitre, tous les résultats des taux de diffusion et des temps de vie associés ont été obtenus en moyennant sur 50 configurations aléatoires de désordre et à une température électronique $T = 100$ K pour la structure de double puits quantique décrite précédemment.

IV.5.1 Comparaison des deux approches

Il est dans un premier temps essentiel de comparer notre approche numérique exacte à celle s’appuyant sur l’approximation de Born décrite en première partie. Nous évaluons pour cela le taux de diffusion $\gamma_{2\mu}$ d’un état $|2\mu\rangle$ dû aux impuretés ionisées et aux désordre d’interface à partir des expressions (IV.14) et (IV.15). L’évolution des taux de diffusion calculés en fonction de l’énergie $\varepsilon_{2\mu}$ de l’état initial est présentée sur la figure IV.3. Pour comparaison, nous calculons également les taux de diffusion $\gamma_{2\vec{k}}$, donnés en (IV.5) et (IV.6), d’un état d’onde plane $|2\vec{k}\rangle$ à l’approximation de Born.

Les courbes obtenues présentent nettement deux régimes d’énergie distincts. Pour les états délocalisés $|2\mu\rangle$ ($\varepsilon_\mu > 0$), l’approche standard apporte une description de plus en plus satisfaisante à mesure que l’énergie de l’état augmente dès lors qu’elle approxime correctement le résultat du calcul numérique exact. En effet, comme nous l’avons démontré en section IV.4, les états de haute énergie se délocalisent davantage dans le plan des couches (Fig. IV.2) et tendent vers des états d’onde plane. Une autre explication à cette tendance réside dans le fait que l’électron délocalisé possède une énergie cinétique importante et par conséquent, reste peu affecté par les diffuseurs de la structure (que ce soit pour les diffusions intra- comme inter-sousbande). Par conséquent, pour ce domaine d’énergie-ci, l’approximation de Born apporte une estimation correcte des taux de diffusion.

En revanche, les états liés ($\varepsilon_\mu < 0$) ne sont pas accessibles à l’approximation de Born car ceux-ci résultent d’ordres supérieurs en perturbation et leur contribution au taux

de diffusion peut être estimée uniquement grâce à la diagonalisation numérique. Remarquons que la localisation spatiale (croissante à mesure que ε_μ diminue) entraîne une augmentation significative du taux de diffusion dès que $\varepsilon_\mu < 0$. Notons en effet un facteur 10 d'écart entre le taux γ estimé avec le calcul exact pour les états de plus basse énergie et les états étendus en présence d'impuretés ionisées estimé à l'approximation de Born. Cette tendance est liée au fait que les états finaux de E_1 sont davantage délocalisés et oscillent spatialement plus rapidement que les états initiaux liés de E_2 . Pour un état initial de E_2 localisé autour d'un minimum de potentiel, nous démontrerons mathématiquement en section IV.5.2 que le taux de diffusion décroît avec la longueur caractéristique de localisation.

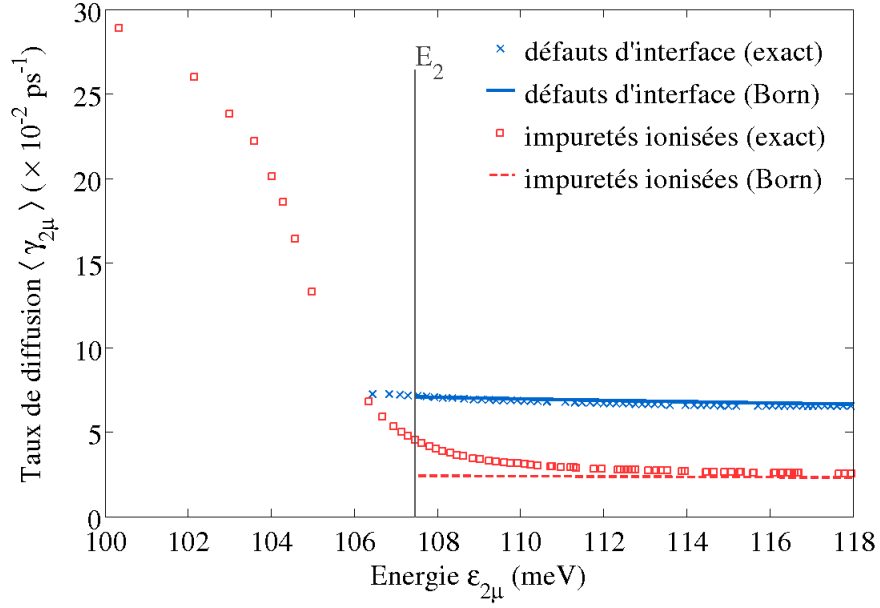


FIGURE IV.3 – Taux de diffusion moyen $\langle \gamma_{2\mu} \rangle$ en fonction des énergies propres du Hamiltonien intra-sousbande H_2 . Le terme V_{dis} dans H_2 correspond soit au potentiel coulombien attractif créé par la distribution de 8 impuretés réparties sur le plan $z_l = 3 \text{ nm}$ (carrés rouges) soit au potentiel de désordre d'interface (croix bleues). Les taux de diffusion associés au potentiel coulombien et à la rugosité d'interface ont également été évalués à l'approximation de Born pour comparaison (traits continu bleu et pointillé rouge respectivement). $E_2 = 107.46 \text{ meV}$, $n_{\text{imp}} = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $f_{\text{def}} = 0.30$, $h_{\text{def}} = 2.83 \text{ \AA}$ et $\sigma = 3.6 \text{ nm}$. $N_{\text{att}} = N_{\text{rep}} = N_{\text{def}}/2$. $T = 100 \text{ K}$. Structure 9/3/2 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75}. Moyenne effectuée sur 50 configurations aléatoires de diffuseurs.

Comme nous l'avons évoqué et observé précédemment, les défauts d'interface génèrent un potentiel d'amplitude plus faible que celui des impuretés. Les états liés créés sont alors moins profonds (Fig. III.3) et dans l'estimation du taux de diffusion, un écart plus faible entre l'approximation de Born et la diagonalisation numérique en résulte. Enfin, pour chaque type de diffuseur, la limite $\mu \rightarrow \vec{k}$ lorsque $\varepsilon_\mu \rightarrow +\infty$ qui avait été établie à partir de l'allure des fonctions d'onde enveloppe des états propres en section IV.4, est confirmée à travers le calcul du taux de diffusion.

Un dernier point important reste à noter. L'énergie de liaison des états liés, en particulier en présence d'impuretés donatrices, s'élève à $E_{\text{lias}} \approx 7.5 \text{ meV}$ (pour cette structure et cette position du plan de dopage), correspondant approximativement

à une température électronique de $T = 100$ K. A cette température, les états d'énergie peuplés sont par conséquent essentiellement des états liés. Il apparait donc que pour ce régime de température, par ailleurs proche des températures de fonctionnement de certains LCQ, l'estimation et la description des processus de diffusion par une approche à l'approximation de Born reste largement insuffisante et la contribution essentielle des états liés parfaitement inexistente. Notons d'ailleurs qu'une diminution de la température des porteurs pourrait mener à une situation d'autant plus critique : l'occupation statistique des états liés serait plus importante et l'écart entre les deux approches de calcul du taux de diffusion serait davantage creusé. Le domaine de température pour lequel une déviation prononcée est attendue est typiquement $T \leq T_{\text{lias}}$ où $k_B T_{\text{lias}} \approx E_{\text{lias}}$. En revanche, pour des températures électroniques $T \gg T_{\text{lias}}$, le régime des états quasi-étendus est atteint et l'approximation de Born apporte une estimation raisonnable des taux de diffusion.

IV.5.2 Modèle de l'état de type s

Comme nous l'évoquions en section IV.5.1, l'augmentation significative des taux de diffusion des états de basse énergie s'explique par la différence de fréquence d'oscillation spatiale entre l'état initial $|2\mu\rangle$ fortement localisé autour d'un centre diffuseur et l'état final $|1\vec{k}'\rangle$ délocalisé dans le plan des couches.

Suite à une remarque de R. Ferreira, intéressons nous dans un premier temps à l'allure de la fonction d'onde enveloppe $|\Phi_{2\mu}|^2$. A titre d'exemple, les graphes de la figure IV.4 montrent les variations de la densité de probabilité normalisée $|\Phi_{2\mu}|^2/\Phi_0$ d'un état lié en présence d'une impureté unique située à la coordonnée $(\vec{\rho}_0, z_l) = (65 \text{ nm}, 107 \text{ nm}, 3 \text{ nm})$ et d'énergie ε_{2s} . Le graphe IV.4.c nous montre également une vue en coupe (suivant la droite $x = 65 \text{ nm}$) de la fonction d'onde enveloppe numérique tracée sur la figure IV.4.a et IV.4.b. Compte tenu de sa localisation autour du centre de l'impureté, il est raisonnable de l'approximer par une expression simple mais réaliste décrivant un état localisé de type hydrogénoïde s .

Considérons alors l'expression de la fonction d'onde de type s localisée en $\vec{\rho}_0$ [132] :

$$\Phi_{2s}(\vec{\rho}, z) = \varphi_{2s}(\vec{\rho})\chi_2(z) = N_{2s}e^{-|\vec{\rho}-\vec{\rho}_0|/l_{\text{loc}}}\chi_2(z) \quad (\text{IV.16})$$

où $N_{2s} = \sqrt{2/(\pi l_{\text{loc}}^2)}$ est la constante de normalisation de la composante φ et l_{loc} est la longueur caractéristique de localisation de l'état autour du centre diffuseur à la coordonnée $\vec{\rho}_0$. A partir de l'expression (IV.16), l'élément de matrice coulombien entre cet état de type s et un état d'onde plane $|1\vec{k}'\rangle$ vaut :

$$\begin{aligned} \langle 1\vec{k}' | V_{\text{imp}} | \Phi_{2s} \rangle &= \frac{N_{2s}}{S} \iiint d\vec{\rho} dz \chi_1(z) \chi_2(z) e^{i\vec{k}' \cdot \vec{\rho}} \\ &\quad \times \frac{-e^2}{\kappa \sqrt{(\vec{\rho} - \vec{\rho}_0)^2 + (z - z_l)^2}} e^{-|\vec{\rho}-\vec{\rho}_0|/l_{\text{loc}}} \quad (\text{IV.17}) \end{aligned}$$

La décomposition de Fourier du potentiel coulombien écranté et le calcul de l'intégrale sur $\vec{\rho}$ dans (IV.17) mènent à l'expression :

$$\langle 1\vec{k}' | V_{\text{imp}} | \Phi_{2s} \rangle = \frac{-2e^2 l_{\text{loc}}}{\kappa \sqrt{2\pi S}} \int_0^\infty dQ \langle 1 | e^{-Q|z-z_l|} | 2 \rangle \int_0^{2\pi} d\theta (1 + |\vec{k}' + \vec{Q}|^2 l_{\text{loc}}^2)^{-\frac{3}{2}} \quad (\text{IV.18})$$

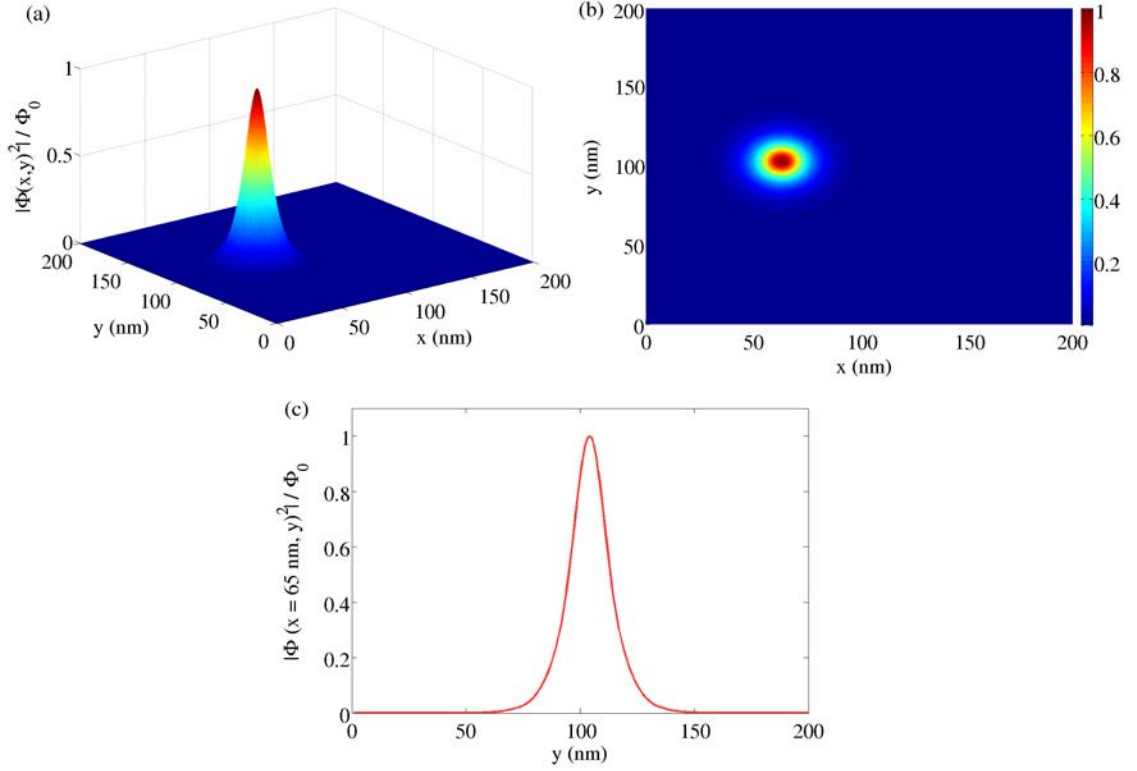


FIGURE IV.4 – (a) et (b) Densité de probabilité électronique normalisée de l'état lié le plus profond ($\varepsilon_{2s} = E_2 - 2.6$ meV) du système en présence d'une unique impureté ionisée à la position ($x = 65$ nm ; $y = 107$ nm). (c) Coupe de la densité de probabilité électronique tracée en (a) et (b) suivant la droite $x = 65$ nm. $z_l = 3$ nm. $T = 100$ K. Structure 9/3/2 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75}.

En première approximation, ce calcul nous donne une dépendance de l'élément de matrice de Coulomb en la longueur caractéristique de localisation suivante :

$$\langle 1\vec{k}' | V_{\text{imp}} | \Phi_{2s} \rangle \propto \frac{1}{l_{\text{loc}}} (1 + k'^2 l_{\text{loc}}^2)^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{IV.19})$$

Cette quantité est inversement proportionnelle à la longueur caractéristique de l'état localisé. Par ailleurs, le taux de diffusion étant proportionnel au carré de cet élément de matrice, la même tendance d'évolution de $\gamma_{2\mu}$ obtenue précédemment à la figure IV.3 est alors attendue : plus l'état lié est profond, autrement dit plus la longueur de localisation est courte, plus le taux de diffusion associé est important. Qualitativement, ceci peut être expliqué par un effet de recouvrement spatial d'une onde très localisée (état initial lié) et d'une onde davantage étendue et à oscillations spatiales rapides dans le plan des couches (état final non lié).

Pour s'en convaincre, nous pouvons reprendre l'expression de l'élément de matrice (IV.18) et développer le calcul du taux de diffusion :

$$\frac{1}{\tau_{2s}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}'} |\langle 1\vec{k}' | V_{\text{imp}} | \Phi_{2s} \rangle|^2 \delta(\varepsilon_{2s} - \varepsilon_{1\vec{k}'}) \quad (\text{IV.20})$$

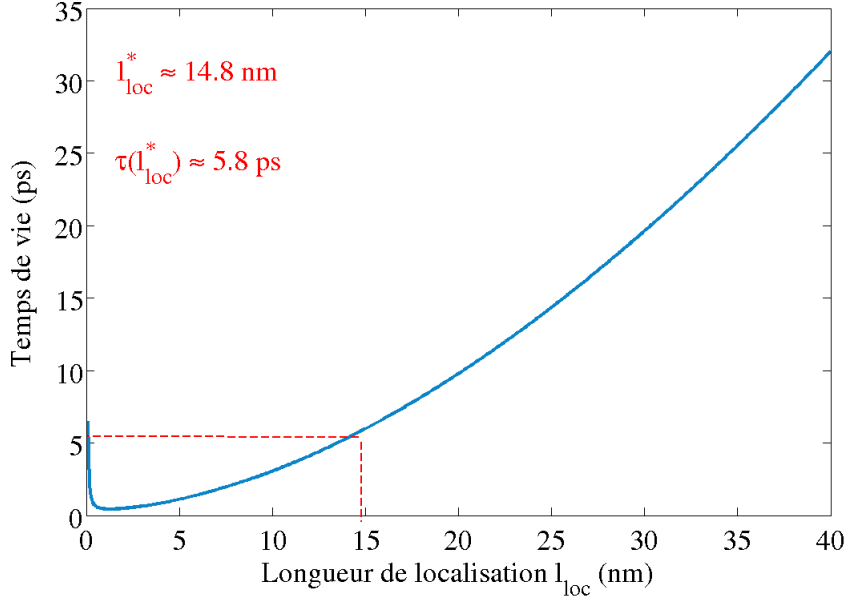


FIGURE IV.5 – Temps de vie d'un état hydrogénoïde s en fonction de sa longueur caractéristique de localisation. Pour une longueur de localisation $l_{\text{loc}} \approx 14.8$ nm, le modèle utilisé prédit un temps de vie de diffusion $\tau \approx 5.8$ ps. $z_l = 3$ nm. $T = 100$ K

Le sommation sur les vecteurs d'onde \vec{k}' donne alors :

$$\frac{1}{\tau_{2s}} = \frac{4m^*e^4}{\hbar^3\pi\kappa^2} \left| \int_0^\infty d\xi \langle 1 | e^{-\xi|z-z_l|/l_{\text{loc}}} | 2 \rangle \right. \\ \left. \times \int_0^\pi d\theta \left(1 + (\xi + \tilde{k})^2 - 4\tilde{k}\xi \sin^2 \frac{\theta}{2} \right)^{-\frac{3}{2}} \right|^2 \quad (\text{IV.21})$$

où $\xi = Ql_{\text{loc}}$ et $\tilde{k} = kl_{\text{loc}}$. Par ailleurs, ici : $k'^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2}(\varepsilon_{2s} - E_1)$. La figure IV.5 montrent l'évolution de τ_{2s} donné en (IV.21) en fonction de la longueur caractéristique de localisation l_{loc} . Comme attendu, le temps de vie de l'état localisé présente une très nette augmentation avec l_{loc} . Par ailleurs, comme cette longueur l_{loc} croît avec l'énergie, l'augmentation (diminution) du temps de vie (taux de diffusion) démontrée à la section précédente est confirmée par ce modèle. Ce calcul analytique nous permet par ailleurs de comparer quantitativement les temps de vie obtenus. A partir de la figure IV.4.c, nous pouvons déterminer graphiquement la longueur caractéristique de localisation de l'état lié exact $|2\mu\rangle$. Celle-ci vaut $l_{\text{loc}} \approx 14.8$ nm et correspond, d'après le graphe de la figure IV.5, à un temps de vie $\tau_{2\mu} \approx 5.8$ ps. Cette valeur est en bon accord avec les temps de vie des états liés de basse énergie de la figure IV.3 pour lesquels $3.5 \text{ ps} < \tau_{2\mu} < 10 \text{ ps}$.

IV.5.3 Densité d'impuretés

Il est par ailleurs intéressant de déterminer les contributions relatives des états liés et des états étendus au taux de diffusion ainsi que l'influence du nombre de diffuseur. Pour cela, nous calculons le temps de vie moyen $\langle \tau_{2\mu} \rangle = \frac{1}{\langle \gamma_{2\mu} \rangle}$ à partir de l'expression (IV.14) pour trois concentrations d'impuretés différentes. Celles-ci correspondent respectivement à un nombre d'impuretés $N_{\text{imp}} = 4, 8$ et 16 . Comme

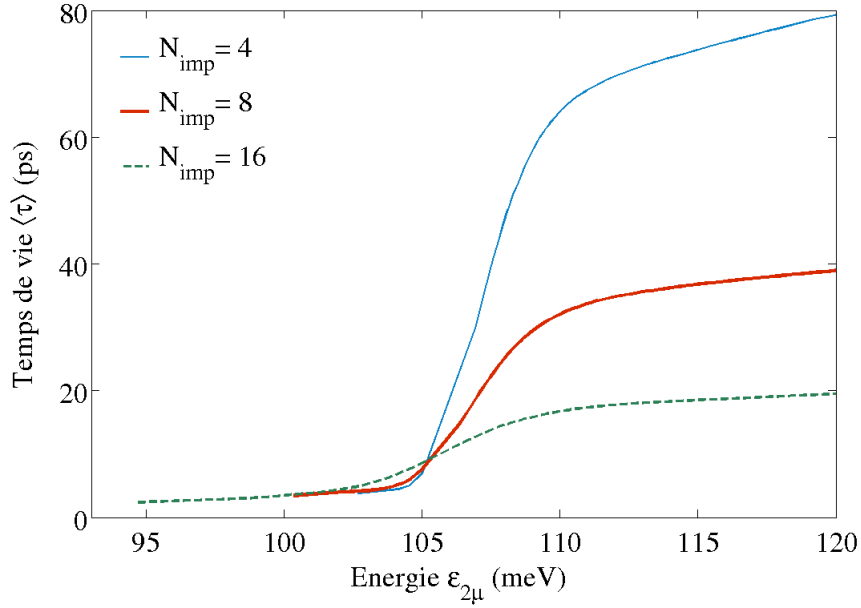


FIGURE IV.6 – Temps de vie moyen de diffusion $\langle \tau \rangle$ en fonction des énergies propres du Hamiltonien intra-sousbande H_2 . Le terme V_{dis} dans H_2 correspond au potentiel coulombien attractif créé par la distribution de N_{imp} impuretés réparties sur le plan $z_l = 3$ nm. Trois concentrations de donneurs sont considérées correspondant respectivement aux nombres d'impuretés suivants : $N_{\text{imp}} = 4$ (continu bleu), $N_{\text{imp}} = 8$ (continu rouge) et $N_{\text{imp}} = 16$ (pointillé vert). $E_2 = 107.46$ meV. $T = 100$ K. Structure 9/3/2 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75}. Moyenne effectuée sur 50 configurations aléatoires d'impuretés.

précédemment, la position du plan de dopage reste fixée à $z_l = 3$ nm.

La figure IV.6 présentent les résultats de ce calcul en fonction de l'énergie propre $\varepsilon_{2\mu}$ de l'état. Comme obtenu au chapitre III, une augmentation de la concentration de donneurs entraîne une augmentation de l'énergie de liaison. On note en effet un facteur 2 d'écart entre l'énergie de liaison maximale en présence de 16 impuretés comparé au cas à 4 impuretés. En revanche, le temps de vie de ces états fortement liés ne dépend pas de leur énergie et les courbes adoptent un comportement asymptotique dans la limite des basses énergies. Notons également que ces temps de vie à basse énergie ne dépendent pas non plus du nombre d'impuretés présentes dans la structure. Ceci s'explique par le fait que dans la limite diluée de désordre à laquelle les trois concentrations considérées appartiennent, les états liés restent localisés autour d'un seul et unique centre diffuseur (voir figure IV.4) et leur contribution au temps de vie est essentiellement indépendante de N_{imp} . En revanche, les états étendus ont une contribution à τ qui est inversement proportionnelle à N_{imp} , comme c'est le cas pour des états d'onde plane d'après l'expression (IV.13). Ainsi, le contraste entre les contributions au temps de vie des états liés et des états étendus est maximum lorsque le dopage de la structure est le plus faible, situation fréquente pour des structures à cascade quantique THz généralement faiblement dopées.

IV.5.4 Position des dopants dans la structure

Le fait de ne pas avoir d'estimation fiable des taux de diffusion inter-sousbande devrait conduire à une réévaluation des hypothèses formulées dans le cadre de la modélisation des hétérostructures, en particulier de la dépendance des taux de diffusion en fonction de la position des dopants dans la structure. Nous illustrons cette dépendance sur la figure IV.7 pour laquelle nous calculons le taux de diffusion $\gamma_{2\mu}$ par diagonalisation numérique en fonction de l'énergie des états propres de H_2 pour trois positions différentes du plan de dopage le long de l'axe de croissance. Ces positions sont les mêmes que celles que nous avons considérées au chapitre III : $z_l = 3$ nm correspondant à un plan de dopage dans le puits quantique le plus large, là où la fonction χ_1 est essentiellement localisée, $z_l = 12.3$ nm repérant un plan de dopage situé au maximum de la fonction χ_2^2 et $z_l = -5$ nm correspondant à un plan de dopage dans la barrière (voir profil de bande de conduction de la structure de la figure III.12).

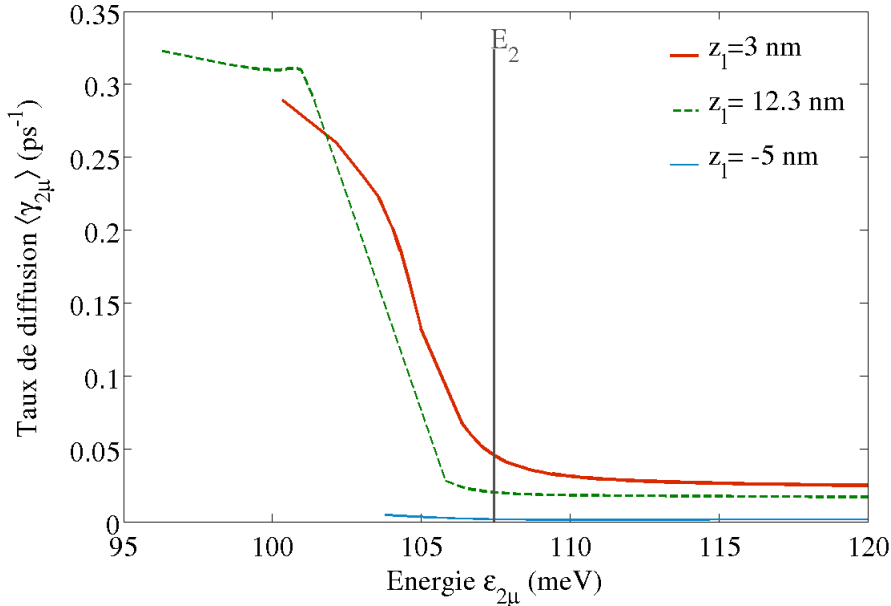


FIGURE IV.7 – Taux de diffusion moyen $\langle \gamma_{2\mu} \rangle$ en fonction des énergies propres du Hamiltonien intra-sousbande H_2 . Le terme V_{dis} dans H_2 correspond au potentiel coulombien attractif créé par la distribution de 8 impuretés réparties sur le plan $z_l = 3$ nm (continu rouge), $z_l = 12.3$ nm (pointillé verte) et $z_l = -5$ nm (continu bleue). $E_2 = 107.46$ meV. $n_{\text{imp}} = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $T = 100$ K. Structure 9/3/2 nm de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75}. Moyenne effectuée sur 50 configurations aléatoires d'impuretés.

Comme nous l'avons déjà évoqué aux chapitres précédents, placer le plan de dopage dans la barrière diminue fortement l'énergie de liaison des électrons aux impuretés et par conséquent, ralentit la fuite des porteurs des états liés. Au contraire, si désormais le plan de dopage est placé à la position qui coïncide avec le maximum de la fonction d'onde enveloppe χ_2 (état initial de la transition), l'effet du potentiel est maximisé, cela conduit alors à de plus profonds états liés fortement localisés et donc à une fuite des porteurs de ces états plus rapide que pour les autres positions $z_l = -5$ nm et $z_l = 3$ nm. Il apparaît encore une fois que la position spécifique des

impuretés dans l'hétérostructure s'avère jouer un rôle crucial.

IV.6 Cas des structures térahertz

Précédemment, nous avons traité le cas d'une structure de double puits quantique asymétrique pour laquelle la séparation d'énergie entre les deux niveaux de sous-bande impliqués dans la diffusion était largement supérieure aux fluctuations du potentiel effectif de désordre introduit. Nous avons obtenu des tendances intéressantes, en particulier liées aux effets de localisation et/ou de délocalisation des états de conduction, influençant ainsi significativement les phénomènes de fuite des porteurs. Il est désormais naturel de se demander si de telles tendances sont également à prévoir pour des structures dont la séparation $E_2 - E_1$ devient comparable à l'échelle d'énergie du potentiel de désordre.

Pour cela, nous considérons de nouveau la structure 9.5/3/8.5 de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75} introduite en section III.5.3 ($E_2 - E_1 = 7.3$ meV). Dans ce cas-ci, nous ne pouvons plus appliquer la simplification qui consiste à remplacer l'état $|1\nu\rangle$ par un état d'onde plane de même énergie mais nous devons plutôt considérer l'expression initiale exacte du taux de diffusion donnée en (IV.10). Nous nous limitons au cas des impuretés ionisées pour lesquelles les effets de localisation sont les plus marqués et nous considérons la même concentration de donneurs aléatoirement répartis sur le plan z_l . Cette position du plan de dopage est fixée à $z_l = 16.8$ nm et coïncide avec le maximum de la fonction d'onde χ_2).

Le calcul de l'élément de matrice du potentiel coulombien écranté entre deux états exacts (IV.10) mène à l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \langle 1\nu | V_{\text{imp}} | 2\mu \rangle &= \frac{e^2}{2\varepsilon_0\varepsilon_r S} \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \sum_{i,i'} e^{i\vec{Q}_{i,i'} \cdot \vec{\rho}_j} c_{1\nu}^*(\vec{k}_i) c_{2\mu}(\vec{k}_{i'}) \\ &\quad \times \int dz \chi_1(z) \chi_2(z) \frac{e^{-\sqrt{Q_{ii'}^2 + q_D^2} |z - z_l|}}{\sqrt{Q_{ii'}^2 + q_D^2}} \quad (\text{IV.22}) \end{aligned}$$

où $\vec{Q}_{ii'} = \vec{k}_i - \vec{k}_{i'}$ est la variation de vecteur d'onde au cours de la diffusion. Notons que cette variation est la différence entre deux vecteurs de base numérique de la restriction intra-soubande du Hamiltonien H . A partir de (IV.22) et de la règle d'or de Fermi, le taux de diffusion $|2\mu\rangle \rightarrow |1\nu\rangle$ se définit par :

$$\begin{aligned} \gamma_{2\mu} &= \frac{\pi e^4}{2\hbar[\varepsilon_0\varepsilon_r]^2 S^2} \sum_{\nu} \left| \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \sum_{i,i'} e^{i\vec{Q}_{i,i'} \cdot \vec{\rho}_j} c_{1\nu}^*(\vec{k}_i) c_{2\mu}(\vec{k}_{i'}) \right. \\ &\quad \times \left. \int dz \chi_1(z) \chi_2(z) \frac{e^{-\sqrt{Q_{ii'}^2 + q_D^2} |z - z_l|}}{\sqrt{Q_{ii'}^2 + q_D^2}} \right|^2 \delta(\varepsilon_{\nu} - \varepsilon_{\mu}) \quad (\text{IV.23}) \end{aligned}$$

Au même titre que les expressions précédentes contenaient une somme sur tous les vecteurs d'onde \vec{k}' , cette équation contient une somme sur tous les états finaux possibles $|1\nu\rangle$. Or, seuls les états vérifiant la conservation $\varepsilon_{\nu} \approx \varepsilon_{\mu}$ sont retenus. Afin

de tenir compte numériquement de cette condition de conservation, la fonction δ est remplacée par une fonction gaussienne de largeur $\sigma_c = 0.3$ meV correspondant à l'espacement en énergie moyen entre deux valeurs propres $\varepsilon_{\nu,\mu}$ consécutives :

$$\delta(\varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_c^2}} \exp\left(-\frac{(\varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu)^2}{2\sigma_c^2}\right) \quad (\text{IV.24})$$

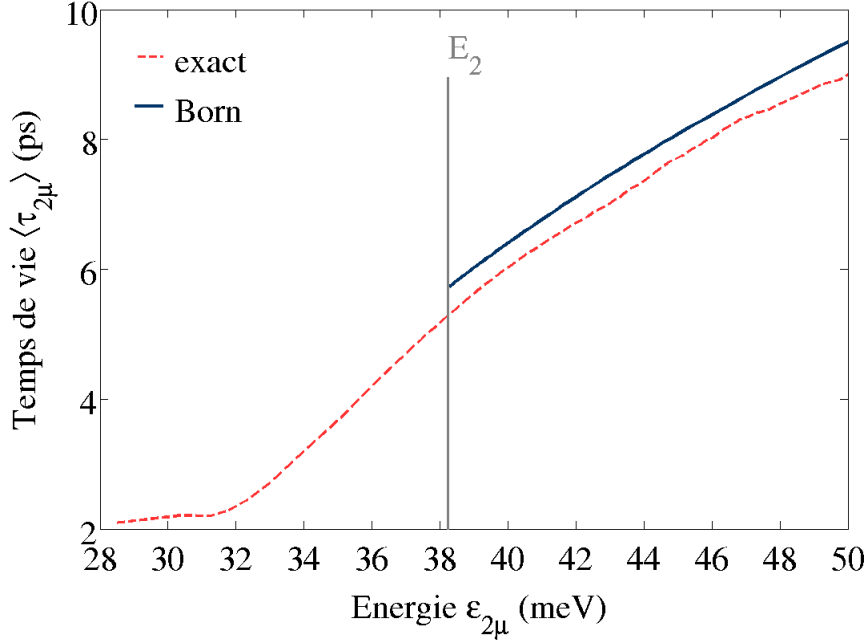


FIGURE IV.8 – Temps de vie moyen $\langle \tau_{2\mu} \rangle$ en fonction des énergies propres du Hamiltonien intra-sousbande H_2 . Le terme V_{dis} dans H_2 correspond au potentiel coulombien attractif créé par la distribution de 8 impuretés réparties sur le plan $z_l = 16.8$ nm (pointillé rouge). Ce temps de vie a également été évalué à l'approximation de Born pour comparaison (continu bleu) . $E_2 = 38.27$ meV, $n_{\text{imp}} = 2.17 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. $T = 100$ K. Moyenne effectuée sur 50 configurations aléatoires de diffuseurs. Structure 9.5/3/8.5 de GaAs/Al_{0.25}GaAs_{0.75}.

La figure IV.8 présente les résultats du calcul de $\langle \tau_{2\mu} \rangle = \frac{1}{\langle \gamma_{2\mu} \rangle}$ issus d'une moyenne sur 50 configurations aléatoires de donneurs. La température électronique reste fixée à $T = 100$ K. Pour comparaison, nous avons également calculé le taux de diffusion par l'approche standard à l'approximation de Born. Les deux régimes d'énergie sont de nouveau observés. De plus, l'allure de la courbe calculée par diagonalisation numérique est similaire à celles de la figure IV.6. Ceci traduit bien l'existence des mêmes effets de localisation des états liés autour de centres diffuseurs uniques. En revanche, la concordance entre l'approche numérique exacte et l'approximation de Born n'est pas immédiatement vérifiée au voisinage du minimum de sous-bande E_2 . En effet, dans ce cas précis où $E_2 - E_1 \approx E_{\text{lias}}$, les états finaux $|1\nu\rangle$ n'appartiennent pas au régime des états de quasi-onde plane. Pour atteindre cette limite $\nu \rightarrow \vec{k}$, il faut considérer des états d'énergie bien supérieure au cas où $E_2 - E_1 \gg E_{\text{lias}}$. Mais rappelons qu'en pratique, pour des températures de l'ordre de 100 K, les seuls états peuplés sont bel et bien les états fortement localisés. Il apparait donc que plus la séparation d'énergie $E_2 - E_1$ est comparable aux énergies de liaison du désordre, plus la description des diffusions à l'approximation de Born est imprécise. Ce point

semble essentiel à considérer dans le cadre de la modélisation des LCQ, en particulier ceux qui émettent dans la gamme THz.

IV.7 Conclusion

L'un des effets les plus néfastes à l'émission laser dans les LCQ est la diffusion inter-sousbande non radiative. Ce processus consiste en la dépopulation du niveau supérieure de la transition laser par diffusion élastique ou inélastique des porteurs. Parmi les nombreuses sources de diffusion possibles, les diffuseurs les plus efficaces sont les défauts d'interface et les impuretés ionisées tandis que l'absorption/émission de phonons LO domine la diffusion inélastique. L'efficacité relative de ces processus de perte est quantitativement exprimée par le taux de diffusion caractéristique. Une bonne connaissance de cette grandeur, inversement proportionnelle au temps de vie de l'état électronique, est essentielle à la modélisation de dispositifs quantiques tels que les LCQ.

La méthode la plus simple et la plus rapide pour estimer sa valeur est d'appliquer la règle d'or de Fermi à l'approximation de Born en considérant ainsi des états électroniques d'onde plane qui sont par définition délocalisés dans le plan des couches. Or, cette approche ne peut tenir compte du fait que les processus intra-sousbande sont plus efficaces que les processus inter-sousbande et conduisent alors à des états électroniques fortement affectés par le couplage au désordre. De plus, cette approximation ne peut prédire des éléments résultant des ordres supérieurs en perturbation telle que l'existence d'états liés d'énergie inférieure au minimum de sous-bande.

Dans ce quatrième et dernier chapitre, nous avons développé une approche de diagonalisation numérique du Hamiltonien du système perturbé par le désordre d'interface et les impuretés donneuses écrantées. L'accès aux états numériques exacts nous a d'une part permis de mettre en évidence d'importants effets de localisation spatiale des états de conduction par le désordre, et d'autre part d'analyser leurs différentes dépendances. Nous avons identifié deux régimes d'énergie. Les états liés de basse énergie fortement localisés autour des centres diffuseurs possèdent des taux de diffusion supérieurs car ils se désintègrent sur des états finaux davantage délocalisés. Les états dont l'énergie est supérieure aux fluctuations typiques du potentiel de diffusion sont étendus dans le plan des couches de croissance et l'approximation d'état d'onde plane est validée. En comparant nos estimations numériques avec celles données à l'approximation de Born, nous avons montré que ces effets de localisation ont une importance cruciale dans l'estimation des taux de diffusion, questionnant ainsi les limites de cette approximation tant sur le plan quantitatif que qualitatif. Cette approche n'est valide qu'à des énergies cinétiques (ou températures) élevées qui doivent être bien supérieures aux fluctuations du potentiel de diffusion. Parallèlement, nous avons étudié l'influence des différents paramètres de désordre. Au même titre que les processus d'absorption assistés par le désordre, l'efficacité des processus de diffusion non radiatifs dépend drastiquement du type des diffuseurs impliqués, de leur nombre mais également de leur position relative à la densité de présence électronique dans la hétérostructure.

Enfin, l'estimation des taux de diffusion pour une structure où l'écart d'énergie

inter-sousbande est comparable à l'énergie de liaison du potentiel de diffusion a montré que la contribution des couplages intra-sousbande était plus importante que dans des structures à grande séparation d'énergie. L'état final, bien que davantage délocalisé que l'état initial, n'appartient pas au régime d'onde plane pour lequel $\nu \rightarrow \vec{k}$. L'approximation de Born n'est alors retrouvée qu'à de très hautes énergies. Il apparait encore une fois que le piégeage des porteurs sur les états d'impureté est un phénomène important qui doit être pris en considération dans la modélisation des structures faiblement dopées telles que les LCQ THz.

Conclusion générale

Les lasers à cascade quantique sont des dispositifs unipolaires qui peuvent en principe émettre dans la gamme THz. Pourtant, jusqu'à présent, aucune émission laser n'a été observée à température ambiante et ces dispositifs restent encore à améliorer. De nombreuses applications ont d'ores et déjà été identifiées et la recherche de structures optimisées est soutenue. Les progrès dans ce domaine sont reliés d'une part au développement de nouveaux designs de structure et d'autre part à une meilleure compréhension théorique des phénomènes de pertes optiques.

Parmi les sources possibles de dégradation des performances des LCQ, on compte notamment la dépopulation du niveau supérieur de la transition laser par diffusion inter-sousbande non radiative des porteurs ainsi que la réabsorption des photons laser par les porteurs libres, en particulier ceux de la zone active qui occupent l'état haut de la transition laser. L'absorption par porteurs libres est un processus bien documenté dans le cas des matériaux massifs pour lesquels le modèle semi-classique de Drude peut être appliqué pour estimer le coefficient d'absorption. Cette approche conduit à une dépendance de l'absorption $\alpha(\omega) \sim \omega^{-p}$ où ω est la fréquence angulaire laser et $p \sim 2 - 3$. Cette relation reste pourtant sérieusement contestable lorsqu'elle est appliquée aux structures LCQ car elle prédit un coefficient d'absorption par porteurs libres de l'ordre de 10^2 cm^{-1} , c'est-à-dire comparable voire même supérieur aux gains réels des LCQ THz.

L'approche semi-classique de Drude repose sur l'hypothèse que les électrons sont accélérés par le champ électrique de l'onde électromagnétique. Dans les systèmes tridimensionnels tels que les matériaux massifs, cette accélération des porteurs est toujours possible dans les trois directions de l'espace. En revanche, dans le cas d'hétérostructures quasi-2D telles que les LCQ, les porteurs sont confinés dans la direction de croissance, direction qui est également celle du champ électrique du mode laser. Dans cette configuration, aucune accélération des électrons par le champ électrique n'est donc possible puisque ceux-ci ont un mouvement libre uniquement dans le plan des couches de croissance. Il y a par conséquent une véritable difficulté conceptuelle à appliquer le modèle semi-classique de Drude pour les systèmes quasi-2D et le développement d'une nouvelle approche quantique d'estimation des pertes par porteurs libres s'est imposé.

La première partie de ce travail de thèse fut consacrée au développement d'un nouveau modèle théorique d'absorption par porteurs libres dans les structures à cascade quantique. Nous avons étudié les transitions intra- et inter-sousbande obliques qu'un électron peut effectuer par absorption du photon laser. Pour un LCQ idéal, une onde électromagnétique polarisée le long de l'axe de croissance, c'est-à-dire se propageant dans le plan des couches, ne peut induire de transition intra- ou inter-

sousbande oblique dès lors que le vecteur d'onde et l'énergie ne peuvent être simultanément conservés. La transition optique est strictement verticale dans l'espace des vecteurs d'onde \vec{k} à cause de l'invariance par translation dans les directions perpendiculaires à l'axe de croissance. Les diffuseurs présents dans la structure, comme les phonons, les impuretés ionisées ou encore les défauts d'interface, brisent cependant cette invariance par translation et activent ces deux types de transitions obliques. A partir de ces considérations, l'absorption par porteurs libres peut être théoriquement traitée comme un phénomène quantique du second ordre qui implique d'une part le photon absorbé et d'autre part un diffuseur de la structure qui assiste la transition en apportant la variation de vecteur d'onde nécessaire.

Nous avons établi une approche perturbative qui consiste à développer les fonctions d'onde électroniques au premier ordre du potentiel de diffusion, et de coupler ces états perturbés avec le photon laser par la règle d'or de Fermi. En utilisant cette nouvelle formulation quantique de l'absorption par porteur libres, nous avons montré que ce processus nécessite un couplage virtuel à une sous-bande excitée. Nous avons calculé le coefficient d'absorption par porteurs libres médiée par différentes sources de diffusion typiques des hétérostructures quasi-2D telles que les donneurs, les défauts d'interface, le désordre d'alliage ou encore les photons LA et LO. Cette première étude a montré que ces coefficients d'absorption sont significativement plus petits que ceux prédits par le modèle semi-classique de Drude pour des lasers THz et pour des températures de fonctionnement typiques (nous avons obtenu des pertes par porteurs libres de l'ordre de 10^{-2} cm^{-1} à $T = 100 \text{ K}$).

Nous avons également analysé les différentes efficacités de chaque diffuseur considéré : en règle générale, les défauts d'interface, le désordre d'alliage et les donneurs restent relativement peu efficaces comparés au couplage électron-phonon LO qui domine les pertes par porteurs libres à haute température. Cela étant, les efficacités respectives des diffuseurs statiques sont fortement dépendantes de la structure ainsi que du matériau utilisé.

Pour conclure cette première partie, nous avons finalement traité le cas de l'absorption par porteurs libres d'une onde électromagnétique polarisée perpendiculairement à la direction de croissance. L'approche perturbative nous a conduit à une décroissance de l'absorption en ω^{-p} en accord avec les hypothèses du modèle semi-classique de Drude où les porteurs sont accélérés par le champ électrique de l'onde lumineuse absorbée. Certes, cette polarisation ne correspond pas à la configuration standard des LCQ mais cette dernière étude a mis en évidence une anisotropie de l'absorption par porteurs libres très marquée en fonction de la polarisation considérée.

Dans la deuxième partie de ce travail de thèse, nous nous sommes intéressée à la forme et la largeur de raie d'absorption inter-sousbande dans les hétérostructures quasi-2D désordonnées. Au lieu d'appliquer l'approche perturbative développée en première partie, le spectre d'absorption de la structure a été calculé en résolvant numériquement l'équation de Schrödinger par diagonalisation numérique du Hamiltonien en présence de désordre. Ce calcul a été effectué pour des structures de double puits quantique de GaAs/(Ga,Al)As en présence de diffuseurs statiques dans le plan des couches de croissance. Nous en avons considéré deux types, d'efficacité importante et constituant des sources de diffusion inévitable pour les porteurs

des LCQ THz : les défauts d'interface et les impuretés ionisées issues du dopage. Cette approche numérique permet d'obtenir une description complète des processus physiques qui conduisent à l'absorption dans les hétérostructures quasi-2D.

Les résultats de nos estimations ont montré qu'aussi bien les défauts que les impuretés modifient la nature du spectre des énergies du système, et cela de manière dramatique, en créant notamment des états liés sous le minimum de sous-bande et fortement localisés spatialement par le désordre. Nous avons parallèlement démontré l'existence de quasi-règles de sélection optiques qui restent néanmoins très efficaces malgré la présence des diffuseurs dans le plan des couches de croissance. Cette forte corrélation entre les états initiaux et finaux de la transition optique contrôle la largeur de la raie d'absorption.

Cette méthode numérique, a également permis l'analyse des domaines d'absorption hors résonance, domaines où les pertes par porteurs libres dominant. Tandis que les diffusions intra-sousbande contrôlent la raie centrale et l'aile de haute énergie, l'aile d'absorption de basse énergie est dominée par les diffusions inter-sousbande. Nous avons finalement comparé ce calcul numérique à l'approche perturbative développée en première partie ainsi qu'avec d'autres modèles d'absorption fréquemment utilisés et basés sur le formalisme des fonctions de corrélation. Le modèle perturbatif d'absorption par porteurs libres présente un excellent accord sur l'intensité et sur la forme de la raie d'absorption avec l'approche de diagonalisation numérique, tandis que les approches de fonctions de corrélation apportent pas une surestimation de l'absorption hors résonance. Cet écart quantitatif est dû aux diverses approximations faites pour le traitement des diffusions induites par le désordre.

Enfin, suivant cette même démarche de calcul numérique, nous avons démontré que l'effet du potentiel de Coulomb généré par les donneurs, pouvait être modifié par un ajustement de la position du plan de dopage dans la structure. Grâce à une position appropriée des dopants, une seule raie d'absorption fine est obtenue malgré d'importants élargissements des états de sous-bande, alors qu'en présence d'états liés, le spectre d'absorption comporte généralement deux raies. Ce résultat a également été démontré par Wacker *et al.* par le formalisme des fonctions de Green hors équilibre.

L'effet le plus néfaste à l'émission laser dans LCQ est la diffusion inter-sousbande non radiative. Celle-ci consiste en la diffusion élastique ou inélastique des porteurs placés initialement sur le niveau supérieur de la transition laser vers une autre sous-bande. Au cours de ce processus, non seulement le photon requis n'est pas émis mais l'état supérieur de la transition laser est dépeuplé. La manière la plus simple de traiter ces diffusions inter-sousbande est d'utiliser l'approximation de Born pour laquelle des états électroniques d'onde plane sont considérés, et de calculer les taux de diffusion par la règle d'or de Fermi. Mais cette méthode reste insatisfaisante car elle n'inclut pas le fait qu'avant de quitter sa sous-bande initiale, l'électron subit un certain nombre de diffusions intra-sousbande. Autrement dit, cette méthode ne prend pas en compte le fait que les états de sous-bande ne sont pas des états idéaux d'onde plane mais plutôt des états fortement perturbés par le désordre.

Pour tenir compte de cet effet, nous avons calculé numériquement les taux de diffusion des états propres de la structure désordonnée par défauts d'interface et par

impuretés ionisées. Ce calcul a conduit à des taux de diffusion significativement plus grands pour les états liés que pour les états de haute énergie (suffisamment éloignés du minimum de sous-bande) qui tendent vers une délocalisation d'onde plane. Cette étude a mis en évidence l'importance cruciale des effets de localisation et de la position des diffuseurs dans l'hétérostructure. En particulier, nous avons montré que les taux de diffusion des états liés diffèrent fortement de ceux obtenus à l'approximation de Born pour des états libres. Il apparaît donc que le piégeage des porteurs sur les états de défauts et d'impuretés est un phénomène important lorsque les densités électroniques sont faibles comme c'est typiquement le cas des LCQ THz.

Les différents effets physiques mis en évidence et les résultats obtenus au terme de ce travail de thèse s'avèrent être utiles à une modélisation réaliste des LCQ. Un autre type de phénomène dégradant l'émission des LCQ consiste en la dépopulation de la sous-bande supérieure de la transition laser par effet Auger. Dans le but de compléter notre description des processus de perte dans ces structures, la perspective principale de ce travail de thèse serait alors d'étudier l'interaction électron-électron dans les structures à cascade quantique désordonnées. En absence de champ magnétique ($B = 0$), les processus électron-électron sont connus pour être moins efficaces que les autres mécanismes de diffusion puisque les densités de porteurs sont faibles dans les LCQ THz. En revanche, à $B \neq 0$ et pour des structures désordonnées, aucune étude théorique n'a encore abouti. Pourtant, des preuves de l'existence de résonances Auger ont été trouvées expérimentalement [129, 133]. Il serait donc intéressant de résoudre ce problème à N-corps afin de déduire un temps de vie Auger et de montrer que ce mécanisme, certes peu compétitif à $B = 0$, peut devenir non négligeable dans le régime de fort champ magnétique à cause de la présence des densités d'états très fines des niveaux de Landau.

Une autre perspective concerne la modélisation des défauts d'interface dans les structures ternaires de type II. Au chapitre I, nous avons évoqué le fait que ces défauts sont probablement de nature plus complexe que ceux des alliages binaires à cause du procédé particulier de croissance des couches. Par ailleurs, il a été montré que les composés ternaires sont des matériaux prometteurs pour la conception de LCQ THz, en particulier grâce aux faibles masses effectives électroniques [105]. Une modélisation précise des interfaces de ces structures contribuerait certainement au développement de ces structures.

Liste des publications

Free carrier absorption in asymmetric double quantum well structures due to static scatterers in the in-plane polarization

C. Ndebeka-Bandou, F. Carosella, R. Ferreira and G. Bastard
Physical Review **B89** 075313 (2014)

Free carrier absorption and inter-subband transitions in imperfect heterostructures

C. Ndebeka-Bandou, F. Carosella, R. Ferreira, A. Wacker and G. Bastard
Topical review, *IOP Semiconductor Science and Technology* **29** 023001 (2014)

Dopant engineering of inter-subband linewidth and lineshape in multi-well heterostructures

C. Ndebeka-Bandou, A. Wacker, F. Carosella, R. Ferreira and G. Bastard
Applied Physics Express **6** 094101 (2013)

Importance of the localization for the inter-subband scattering rates in quasi two-dimensional structures

C. Ndebeka-Bandou, F. Carosella, R. Ferreira and G. Bastard
Applied Physics Letters **102** 191105 (2013)

Relevance of intra- and inter-subband scattering in heterostructures

C. Ndebeka-Bandou, F. Carosella, R. Ferreira, A. Wacker and G. Bastard
Applied Physics Letters **101** 191104 (2012)

Free carrier absorption in quantum cascade structures

F. Carosella, C. Ndebeka-Bandou, R. Ferreira, E. Dupont, K. Unterrainer, G. Strasser, A. Wacker and G. Bastard
Physical Review **B85** 085310 (2012)

Actes de conférence

Importance of the localization for scattering rates in disordered heterostructures

C. Ndebeka-Bandou, F. Carosella, R. Ferreira and G. Bastard

International Workshop on Computational Electronics (IWCE), 2014, Paris (France)

Absorption in disordered heterostructures : contribution from intra- and inter-subband scattering and effect of localised states

F. Carosella, C. Ndebeka-Bandou, A. Wacker, R. Ferreira and G. Bastard

International Workshop on Computational Electronics (IWCE), 2014, Paris (France)

Carrier dynamics in imperfect Quantum Cascade Structures

G. Bastard, C. Ndebeka-Bandou and F. Carosella

International Workshop on Computational Electronics (IWCE), 2014, Paris (France)

Terahertz spectroscopy of sublevel structures in single self-assembled InAs quantum dots

Y. Zhang, K. Shibata, N. Nagai, C. Ndebeka-Bandou and K. Hirakawa

International Symposium on Nanoscale Transport and Technology (ISNTT), 2013, Atsugi Kanagawa (Japan)

Ternary based Ga(In)As/Ga(As,Sb) cascade structures emitting in the THz range

C. Ndebeka-Bandou, C. Deutsch, H. Detz, M. Andrews, G. Strasser, K. Unterrainer, F. Carosella, R. Ferreira, A. Wacker and G. Bastard

International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures (EDISON), 2013, Mastue (Japan)

Importance of the localization for scattering rates in heterostructures

C. Ndebeka-Bandou, F. Carosella, R. Ferreira and G. Bastard

International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures (EDISON), 2013, Mastue (Japan)

Optical quasi-selection rules in imperfect two-dimensional heterostructures

C. Ndebeka-Bandou, F. Carosella, R. Ferreira, A. Wacker and G. Bastard

International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures (EDISON), 2013, Mastue (Japan)

Relevance of intra-subband and inter-subband scattering on the absorption in disordered heterostructures

F. Carosella, C. Ndebeka-Bandou, R. Ferreira, A. Wacker and G. Bastard
International Conference on Intersubband Transitions in Quantum Wells (ITQW),
2013, Bolton Landing (USA)

Importance of the localization for inter-subband scattering rates in quasi two-dimensional structures

F. Carosella, C. Ndebeka-Bandou, R. Ferreira and G. Bastard
International Conference on Intersubband Transitions in Quantum Wells (ITQW),
2013, Bolton Landing (USA)

Scattering in cascade structures : modelling of non radiative transitions and free carrier absorption

G. Bastard, F. Carosella, F.-R. Jasnot, C. Ndebeka-Bandou, L.-A. de Vaultier and R. Ferreira
International Quantum Cascade Lasers School and Workshop (IQCLSW), 2012,
Baden (Autriche)

Quasi-selection rules for intra- and inter-subband oblique transitions in quantum cascade structures : effect of the free carrier absorption

G. Bastard, C. Ndebeka-Bandou, F. Carosella, R. Ferreira and A. Wacker
International Quantum Cascade Lasers School and Workshop (IQCLSW), 2012,
Baden (Autriche)

Crypto-selection rules for intra- and inter-subband oblique transitions in quantum cascade structures : effect on the free carrier absorption

C. Ndebeka-Bandou, F. Carosella, R. Ferreira and G. Bastard
Journées de la Matière Condensée (JMC13), 2012, Montpellier (France)

Free carrier absorption in quantum cascade structures

G. Bastard, F. Carosella, C. Ndebeka-Bandou and R. Ferreira
A COMPLETER, 2012, Fukui (Japon)

Free carrier absorption in quantum cascade lasers

F. Carosella, C. Ndebeka-Bandou, A. Wacker, R. Ferreira and G. Bastard
International Conference on Intersubband Transitions in Quantum Wells (ITQW),
2011, Badesi (Italie)

Bibliographie

- [1] M. Tonouchi. Cutting-edge terahertz technology. *Nature Photonics*, 1 :104, 2007.
- [2] M. Lee and M. C. Wanke. Searching for a Solid-State Terahertz Technology. *Science*, 316(5821) :64–65, 2007.
- [3] B. Ferguson and X.-C. Zhang. Materials for terahertz science and technology. *Nature Materials*, 1 :26–33, 2002.
- [4] C. Gmachl, F. Capasso, D. L. Sivco, and A. Y. Cho. Recent progress in quantum cascade lasers and applications. *Reports on Progress in Physics*, 64(11) :1533, 2001.
- [5] M. S. Vitiello and A. Tredicucci. Tunable emission in THz quantum cascade lasers. *IEEE Trans. THz Sci. Technol.*, 1 :76–84, 2011.
- [6] C. Sirtori, S. Barbieri, and R. Colombelli. Wave engineering with THz quantum cascade lasers. *Nature Photonics*, 7 :691, 2013.
- [7] H. C. Liu and F. Capasso. *Intersubband Transitions in Quantum Wells : Physics and Device Applications II*, volume 66 of *Semiconductors and Semimetals*. Academic Press, San Diego, 2000.
- [8] J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, and Alfred Y. Cho. Quantum Cascade Laser. *Science*, 264(5158) :553–556, 1994.
- [9] R. Kohler, A. Tredicucci, F. Beltram, H. Beere, E. Linfield, G. Davies, D. Ritchie, R. C. Iotti, and F. Rossi. Terahertz semiconductor- heterostructure laser. *Nature Photonics*, 417(6885) :156–159, 2002.
- [10] B. S. Williams. Terahertz quantum-cascade lasers. *Nature Photonics*, 1(9) :517–525, 2007.
- [11] S. Kumar, C. W. I. Chan, Q. Hu, and J. Reno. Two-well terahertz quantum-cascade laser with direct intrawell-phonon depopulation. *Applied Physics Letters*, 95(14) :141110, 2009.
- [12] Q. Y. Lu, Y. Bai, N. Bandyopadhyay, S. Slivken, and M. Razeghi. 2.4 W room temperature continuous wave operation of distributed feedback quantum cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 98(18) :181106, 2011.
- [13] Y. Bai, N. Bandyopadhyay, S. Tsao, S. Slivken, and M. Razeghi. Room temperature quantum cascade lasers with 27% wall plug efficiency. *Applied Physics Letters*, 98(18) :181102, 2011.

- [14] Y. Yao, A. J. Hoffman, and C. F. Gmachl. Mid-infrared quantum cascade lasers. *Nature Photonics*, 6 :432–439, 2012.
- [15] W. Walukiewicz, L. Lagowski, L. Jastrzebski, M. Lichtensteiger, and H. C. Gatos. Electron mobility and free-carrier absorption in GaAs : Determination of the compensation ratio. *Journal of Applied Physics*, 50(2) :899–908, 1979.
- [16] K. A. Bulashevich, V. F. Mymrin, S. Yu. Karpov, D. M. Demidov, and A. L. Ter-Martirosyan. Effect of free-carrier absorption on performance of 808 nm AlGaAs-based high-power laser diodes. *Semiconductor Science and Technology*, 22(5) :502, 2007.
- [17] A. Wacker, G. Bastard, F. Carosella, R. Ferreira, and E. Dupont. Unraveling of free-carrier absorption for terahertz radiation in heterostructures. *Phys. Rev. B*, 84 :205319, 2011.
- [18] S. Slivken, V. I. Litvinov, M. Razeghi, and J. R. Meyer. Relaxation kinetics in mid-infrared quantum cascade lasers . *Opto-electronics Review*, 6(3) :207–216, 1998.
- [19] A. Y. Cho. *J. Vac. Science and Tech.*, 8 :531, 1971.
- [20] J. Y. Tsao. *Material Fundamentals of Molecular Beam Epitaxy*. Academic Press, Boston, 1993.
- [21] M. Razeghi. *The MOCVD Challenge : A survey of GaInAsP-InP and GaInAsP-GaAs for photonic and electronic device applications*. CRC Press, New York, 2011.
- [22] E. Gornik and D. C. Tsui. Voltage-Tunable Far-Infrared Emission from Si Inversion Layers. *Phys. Rev. Lett.*, 37 :1425–1428, 1976.
- [23] T. Ando. Screening Effect and Quantum Transport in a Silicon Inversion Layer in Strong Magnetic Fields. *Journal of the Physical Society of Japan*, 43(5) :1616–1626, 1977.
- [24] L. Esaki and R. Tsu. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. *IBM J. Res. Dev.*, 14 :61, 1970.
- [25] R. F. Kazarinov and R. A. Suris. Possibility of the amplification of electromagnetic waves in a semiconductor with a superlattice. *Soviet Physics Semiconductors*, 5(4) :707, 1971.
- [26] R. F. Kazarinov and R. A. Suris. Electric and electromagnetic properties of a superlattice. *Soviet Physics Semiconductors*, 6 :120, 1972.
- [27] L. C. West and S. J. Eglash. First observation of an extremely large-dipole infrared transition within the conduction band of a GaAs quantum well. *Applied Physics Letters*, 46(12) :1156–1158, 1985.
- [28] M. Helm, P. England, E. Colas, F. DeRosa, and S. J. Allen. Intersubband emission from semiconductor superlattices excited by sequential resonant tunneling. *Phys. Rev. Lett.*, 63 :74–77, 1989.

-
- [29] H. C. Liu and F. Capasso. *Intersubband Transitions in Quantum Wells : Physics and Device Applications I*, volume 62 of *Semiconductors and Semimetals*. Academic Press, San Diego.
 - [30] B. F. Levine. Recent Progress in Quantum Well Infrared Photodetectors. In Emmanuel Rosencher, Børge Vinter, and Barry Levine, editors, *Intersubband Transitions in Quantum Wells*, volume 288 of *NATO ASI Series*, pages 43–55. Springer US, 1992.
 - [31] L. Gendron, M. Carras, A. Huynh, V. Ortiz, C. Koeniguer, and V. Berger. Quantum cascade photodetector. *Applied Physics Letters*, 85(14) :2824–2826, 2004.
 - [32] B. B. Hu and M. C. Nuss. Imaging with terahertz waves. *Opt. Lett.*, 20(16) :1716–1718, 1995.
 - [33] A. Kosterev, G. Wysocki, Y. Bakhirkin, S. So, R. Lewicki, M. Fraser, F. Tittel, and R.F. Curl. Application of quantum cascade lasers to trace gas analysis. *Applied Physics B*, 90(2) :165–176, 2008.
 - [34] C. D. Sudworth, A. J. Fitzgerald, E. Berry, N. N. Zinov'ev, S. Homer-Vanniasinkam, R. E. Miles, M. Chamberlain, and M. A. Smith. Optical properties of tissue at terahertz frequencies. *Proc. SPIE*, 5143 :59–68, 2003.
 - [35] D. Clery. Terahertz on a Chip. *Science*, 297(5582) :763, 2002.
 - [36] S. S. Dhillon, C. Sirtori, J. Alton, S. Barbieri, A. De Rossi, H. Beere, and D. Ritchie. Terahertz transfer onto a telecom optical carrier. *Nature Photonics*, 1(7) :411–415, 2007.
 - [37] T. Steinmetz, T. Wilken, C. Araujo-Hauck, R. Holzwarth, T. W. Hänsch, L. Pasquini, A. Manescau, S. D'Odorico, M. T. Murphy, T. Kentischer, W. Schmidt, and T. Udem. Laser Frequency Combs for Astronomical Observations. *Science*, 321(5894) :1335–1337, 2008.
 - [38] A. Wacker. Quantum Cascade Laser : An Emerging Technology. In K. Lüdge, editor, *Nonlinear Laser Dynamics*, Berlin, 2012. Wiley-VCH.
 - [39] Jérôme Faist. *Quantum Cascade Lasers*. Oxford University Press, Oxford, 2013.
 - [40] M. Helm. *Intersubband Transitions in Quantum Wells : Physics and Device Applications II edited by H. Liu and F. Capasso*. Elsevier, Amsterdam, 1999.
 - [41] K. P. O'Donnell and X. Chen. Temperature dependence of semiconductor band gaps. *Applied Physics Letters*, 58(25) :2924–2926, 1991.
 - [42] C. Sirtori, P. Kruck, S. Barbieri, P. Collot, J. Nagle, M. Beck, J. Faist, and U. Oesterle. GaAs/Al_xGa(1-x)As quantum cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 73(24) :3486–3488, 1998.
 - [43] E. Benveniste, A. Vasanelli, A. Delteil, J. Devenson, R. Teissier, A. Baranov, A. M. Andrews, G. Strasser, I. Sagnes, and C. Sirtori. Influence of the material parameters on quantum cascade devices. *Applied Physics Letters*, 93(13) :131108, 2008.

- [44] A. Wacker. Extraction-controlled quantum cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 97(8) :081105, 2010.
- [45] E. Dupont, S. Fatholouloumi, Z. R. Wasilewski, G. Aers, S. R. Laframboise, M. Lindskog, S. G. Razavipour, A. Wacker, D. Ban, and H. C. Liu. A phonon scattering assisted injection and extraction based terahertz quantum cascade laser. *Journal of Applied Physics*, 111(7) :073111, 2012.
- [46] G. Scalari, M. I. Amanti, M. Fischer, R. Terazzi, C. Walther, M. Beck, and J. Faist. Step well quantum cascade laser emitting at 3 THz. *Applied Physics Letters*, 94(4) :041114, 2009.
- [47] H. Yasuda, T. Kubis, P. Vogl, N. Sekine, I. Hosako, and K. Hirakawa. Nonequilibrium Green’s function calculation for four-level scheme terahertz quantum cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 94(15) :151109, 2009.
- [48] N. Jukam, S. S. Dhillon, D. Oustinov, J. Madeo, C. Manquest, S. Barbieri, C. Sirtori, S. P. Khanna, E. Linfield, G. Davies, and J. Tignon. Terahertz amplifier based on gain switching in a quantum cascade laser. *Nature Photonics*, 3(12) :715–719, 2009.
- [49] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Harcourt, New York, 1976.
- [50] D. J. BenDaniel and C. B. Duke. Space-Charge Effects on Electron Tunneling. *Phys. Rev.*, 152 :683–692, 1966.
- [51] G. Bastard, J. A. Brum, and R. Ferreira. Electronic states in semiconductor heterostructures. *Solid State Physics*, 44 :229, 1991.
- [52] P. Harrison. *Quantum wells, wires and dots. Theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures* . John Wiley and Sons, 2006.
- [53] R. Lukic-Zrnic, B. P. Gorman, R. J. Cottier, T. D. Golding, C. L. Littler, and A. G. Norman. Temperature dependence of the band gap of GaAsSb epilayers. *Journal of Applied Physics*, 92(11) :6939–6941, 2002.
- [54] C. Ndebeka-Bandou, F. Carosella, R. Ferreira, A. Wacker, and G. Bastard. Free carrier absorption and inter-subband transitions in imperfect heterostructures. *Semiconductor Science and Technology*, 29(2) :023001, 2014.
- [55] R. Ferreira and G. Bastard. Tunnelling and relaxation in semiconductor double quantum wells. *Reports on Progress in Physics*, 60(3) :345, 1997.
- [56] A. Lops, V. Spagnolo, and G. Scamarcio. Thermal modeling of GaInAs/AlInAs quantum cascade lasers. *Journal of Applied Physics*, 100(4) :3089, 2006.
- [57] C. Gmachl, F. Capasso, A. Tredicucci, D. L. Sivco, R. Kohler, A. L. Hutchinson, and A. Cho. *IEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, 5 :3, 1999.
- [58] G. Bastard. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*. EDP Science, Paris, 1996.

-
- [59] E. Benveniste. Etude du gain des lasers à cascade quantique dans le moyen infrarouge. 2009.
 - [60] T. Ando. Broadening of Inter-Subband Transitions in Image-Potential-Induced Surface States outside Liquid Helium. *Journal of the Physical Society of Japan*, 44(3) :765–773, 1978.
 - [61] T. Ando. Line Width of Inter-Subband Absorption in Inversion Layers : Scattering from Charged Ions. *Journal of the Physical Society of Japan*, 54(7) :2671–2675, 1985.
 - [62] A. Wittmann, Y. Bonetti, J. Faist, E. Gini, and M. Giovannini. Intersubband linewidths in quantum cascade laser designs. *Applied Physics Letters*, 93(14) :141103, 2008.
 - [63] T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern. Electronic properties of two-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.*, 54 :437–672, 1982.
 - [64] Y. Song, Y. Lu, B. Zhang, X. Xu, J. Wang, Y. Guo, K. Shi, Z. Li, X. Liu, S. Yang, Q. Zhu, and Z. Wang. Intersubband absorption energy shifts in 3-level system for asymmetric quantum well terahertz emitters. *Journal of Applied Physics*, 108(8) :083112, 2010.
 - [65] T. Unuma, S. Takata, Y. Sakasegawa, K. Hirakawa, and A. Nakamura. Intersubband transition energy and linewidth modified by a submonolayer AlAs insertion into GaAs quantum wells. *Journal of Applied Physics*, 109(4) :043506, 2011.
 - [66] J. Hu, X. G. Xu, J. A. H. Stotz, S. P. Watkins, A. E. Curzon, M. L. W. Thewalt, N. Matine, and C. R. Bolognesi. Type II photoluminescence and conduction band offsets of GaAsSb/InGaAs and GaAsSb/InP heterostructures grown by metalorganic vapor phase epitaxy. *Applied Physics Letters*, 73(19) :2799–2801, 1998.
 - [67] N. Regnault, R. Ferreira, and G. Bastard. Broadening effects due to alloy scattering in a quantum cascade laser. *Phys. Rev. B*, 76 :165121, 2007.
 - [68] Y. Chen, N. Regnault, R. Ferreira, Bang-Fen Zhu, and G. Bastard. Optical-phonon scattering and theory of magneto-polarons in a quantum well in a strong magnetic field. *Phys. Rev. B*, 79 :235314, 2009.
 - [69] J. R. Hayes, A. R. Adams, and P. D. Greene. *GaInAsP Alloy Semiconductors*. Wiley New York, 1982.
 - [70] G. Bastard. Energy levels and alloy scattering in InP-In (Ga)As heterojunctions. *Applied Physics Letters*, 43(6) :591–593, 1983.
 - [71] H. Sakaki, T. Noda, K. Hirakawa, M. Tanaka, and T. Matsusue. Interface roughness scattering in GaAs/AlAs quantum wells. *Applied Physics Letters*, 51(23) :1934–1936, 1987.
 - [72] J. B. Khurgin. Inhomogeneous origin of the interface roughness broadening of intersubband transitions. *Applied Physics Letters*, 93(9) :091104, 2008.

- [73] S. M. Goodnick, D. K. Ferry, C. W. Wilmsen, Z. Liliental, D. Fathy, and O. L. Krivanek. Surface roughness at the Si(100)-SiO₂ interface. *Phys. Rev. B*, 32 :8171–8186, 1985.
- [74] R. M. Feenstra, D. A. Collins, D. Z. Y. Ting, M. W. Wang, and T. C. McGill. Interface roughness and asymmetry in InAs/GaSb superlattices studied by scanning tunneling microscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 72 :2749–2752, 1994.
- [75] S. Mori and T. Ando. Intersubband scattering effect on the mobility of a Si (100) inversion layer at low temperatures. *Phys. Rev. B*, 19 :6433–6441, 1979.
- [76] C. Ndebeka-Bandou, F. Carosella, R. Ferreira, A. Wacker, and G. Bastard. Relevance of intra- and inter-subband scattering on the absorption in heterostructures. *Applied Physics Letters*, 101(19) :191104, 2012.
- [77] P. Harrison. The nature of the electron distribution functions in quantum cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 75(18) :2800–2802, 1999.
- [78] P. J. Price. Two-dimensional electron transport in semiconductor layers. *Ann. Phys.*, 133 :217, 1981.
- [79] H. C. Liu, M. Wächter, D. Ban, Z. R. Wasilewski, M. Buchanan, G. C. Aers, J. C. Cao, S. L. Feng, B. S. Williams, and Q. Hu. Effect of doping concentration on the performance of terahertz quantum-cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 87(14) :141102, 2005.
- [80] I. Vurgaftman and J. R. Meyer. Analysis of limitations to wallplug efficiency and output power for quantum cascade lasers. *Journal of Applied Physics*, 99(12) :123108, 2006.
- [81] L. Ajili, G. Scalari, M. Giovannini, N. Hoyler, and J. Faist. Doping in quantum cascade lasers. II. GaAs/AlGaAs terahertz devices. *Journal of Applied Physics*, 100(4) :043102, 2006.
- [82] J. Faist. Wallplug efficiency of quantum cascade lasers : Critical parameters and fundamental limits. *Applied Physics Letters*, 90(25) :253512, 2007.
- [83] E. Benveniste, S. Laurent, A. Vasanelli, C. Manquest, C. Sirtori, F. Teulon, M. Carras, and X. Marcadet. Measurement of gain and losses of a midinfrared quantum cascade laser by wavelength chirping spectroscopy. *Applied Physics Letters*, 94(8) :081110, 2009.
- [84] W. P. Dumke. Quantum Theory of Free Carrier Absorption. *Phys. Rev.*, 124 :1813–1817, 1961.
- [85] J. Pankove. Optical Processes in Semiconductors. 1971.
- [86] B. Jensen. Theory of free carrier absorption in InSb. *Solid State Commun.*, 9(18) :1587–1589, 1971.
- [87] B. Jensen. Quantum theory of free carrier absorption in polar semiconductors. *Ann. Phys.*, 80(2) :284–360, 1973.

-
- [88] P. Y. Yu and M. Cardona. *Fundamentals of Semiconductors*. Springer-Verlag, Berlin, 1999.
 - [89] M. Martl, J. Darmo, C. Deutsch, M. Brandstetter, A. M. Andrews, P. Klang, G. Strasser, and K. Unterrainer. Gain and losses in THz quantum cascade laser with metal-metal waveguide. *Opt. Express*, 19(2) :733–738, 2011.
 - [90] D. Burghoff, T.-Y. Kao, D. Ban, A. W. M. Lee, Q. Hu, and J. Reno. A terahertz pulse emitter monolithically integrated with a quantum cascade laser. *Applied Physics Letters*, 98(6) :061112, 2011.
 - [91] M. Giehler, H. Kostial, R. Hey, and H. T. Grahn. Effect of free-carrier absorption on the threshold current density of GaAs/(Al,Ga)As quantum-cascade lasers. *Journal of Applied Physics*, 96(9) :4755–4761, 2004.
 - [92] I. Vurgaftman and J. R. Meyer. TE- and TM-polarized roughness-assisted free-carrier absorption in quantum wells at midinfrared and terahertz wavelengths. *Phys. Rev. B*, 60 :14294–14301, 1999.
 - [93] H. N. Spector. Free-carrier absorption in quasi-two-dimensional semiconducting structures. *Phys. Rev. B*, 28 :971–976, 1983.
 - [94] H. Adamska and H. N. Spector. Free carrier absorption in quantum well structures for polar optical phonon scattering. *Journal of Applied Physics*, 56(4) :1123–1127, 1984.
 - [95] H. Willenberg, G. H. Döhler, and J. Faist. Intersubband gain in a Bloch oscillator and quantum cascade laser. *Phys. Rev. B*, 67 :085315, 2003.
 - [96] A. C. Betz, S. H. Jhang, E. Pallecchi, R. Ferreira, G. Fève, J-M. Berroir, and B. Placais. Supercollision cooling in undoped graphene. *Nature Physics*, 9(2) :109–112, 2013.
 - [97] A. Haug. Free-carrier absorption in semiconductor lasers. *Semiconductor Science and Technology*, 7(3) :373, 1992.
 - [98] F. Carosella, C. Ndebeka-Bandou, R. Ferreira, E. Dupont, K. Unterrainer, G. Strasser, A. Wacker, and G. Bastard. Free-carrier absorption in quantum cascade structures. *Phys. Rev. B*, 85 :085310, 2012.
 - [99] A. Leuliet, A. Vasanelli, A. Wade, G. Fedorov, D. Smirnov, G. Bastard, and C. Sirtori. Electron scattering spectroscopy by a high magnetic field in quantum cascade lasers. *Phys. Rev. B*, 73 :085311, 2006.
 - [100] R. Ferreira and G. Bastard. Evaluation of some scattering times for electrons in unbiased and biased single- and multiple-quantum-well structures. *Phys. Rev. B*, 40 :1074–1086, 1989.
 - [101] F. Carosella, R. Ferreira, G. Strasser, K. Unterrainer, and G. Bastard. Blueshift of intersubband magneto-optical transitions linked to void states of thin barriers in multiple quantum well structures. *Phys. Rev. B*, 82 :033307, 2010.

- [102] M. Abramovitz and I. A. Stegun. *Handbook of mathematical functions*, volume Dover. 1965.
- [103] C. Ndebeka-Bandou, A. Wacker, F. Carosella, R. Ferreira, and G. Bastard. Dopant Engineering of Inter-Subband Linewidth and Lineshape in Multiwell Heterostructures. *Applied Physics Express*, 6(9) :094101, 2013.
- [104] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan. Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, 89(11) :5815–5875, 2001.
- [105] C. Deutsch, A. Benz, H. Detz, P. Klang, M. Nobile, A. M. Andrews, W. Schrenk, T. Kubis, P. Vogl, G. Strasser, and K. Unterrainer. Terahertz quantum cascade lasers based on type II InGaAs/GaAsSb/InP. *Applied Physics Letters*, 97(26) :261110, 2010.
- [106] C. Ndebeka-Bandou, F. Carosella, R. Ferreira, and G. Bastard. Free-carrier absorption in asymmetric double quantum well structures due to static scatterers in the in-plane polarization. *Phys. Rev. B*, 89 :075313, 2014.
- [107] K. Unterrainer. *Intersubband Transitions in Quantum Wells : Physics and Device Applications II* edited by H. Liu and F. Capasso. Academic Press, San Diego CA, 2000.
- [108] C. Sirtori, F. Capasso, J. Faist, and S. Scandolo. Nonparabolicity and a sum rule associated with bound-to-bound and bound-to-continuum intersubband transitions in quantum wells. *Phys. Rev. B*, 50 :8663–8674, 1994.
- [109] B. Gelmont, V. Gorfinkel, and S. Luryi. Theory of the spectral line shape and gain in quantum wells with intersubband transitions. *Applied Physics Letters*, 68(16) :2171–2173, 1996.
- [110] J. Serre, A. Ghazali, and A. Gold. Impurity levels, impurity bands, excited impurity bands, and band tails : The electronic density of states in quantum wells and heterostructures. *Phys. Rev. B*, 39 :8499–8510, 1989.
- [111] A. Ghazali and J. Serre. Multiple-Scattering Approach to the Formation of the Impurity Band in Semiconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 48 :886–889, 1982.
- [112] J. B. Khurgin, Y. Dikmelik, P. Q. Liu, A. J. Hoffman, M. D. Escarra, K. J. Franz, and C. F. Gmachl. Role of interface roughness in the transport and lasing characteristics of quantum-cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 94(9) :091101, 2009.
- [113] Y. Chiu, Y. Dikmelik, P. Q. Liu, N. L. Aung, J. B. Khurgin, and C. Gmachl. Importance of interface roughness induced intersubband scattering in mid-infrared quantum cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 101(17) :171117, 2012.
- [114] T. Unuma, M. Yoshita, T. Noda, H. Sakaki, and H. Akiyama. Intersubband absorption linewidth in GaAs quantum wells due to scattering by interface roughness, phonons, alloy disorder, and impurities. *Journal of Applied Physics*, 93(3) :1586–1597, 2003.

-
- [115] A. Wacker, M. Lindskog, and D.O. Winge. Nonequilibrium Green's Function Model for Simulation of Quantum Cascade Laser Devices Under Operating Conditions. *Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal*, 19(5) :1200611, 2013.
- [116] F. Banit, S.-C. Lee, A. Knorr, and A. Wacker. Self-consistent theory of the gain linewidth for quantum-cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 86(4) :041108, 2005.
- [117] A. Wacker, R. Nelander, and C. Weber. Simulation of gain in quantum cascade lasers. *SPIE*, 7230 :72301A, 2009.
- [118] H. Callebaut, S. Kumar, B. S. Williams, Q. Hu, and J. L. Reno. Importance of electron-impurity scattering for electron transport in terahertz quantum-cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 84(5) :645–647, 2004.
- [119] X. L. Lei. Dynamical screening and carrier mobility in GaAs-GaAlAs heterostructures. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 18 :593, 1985.
- [120] R. Nelander and A. Wacker. Temperature dependence and screening models in quantum cascade structures. *Journal of Applied Physics*, 106(6) :063115, 2009.
- [121] H. Haug and A.-P. Jauho. *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*. Springer Berlin, 1996.
- [122] C. Metzner, M. Hofmann, and G. H. Döhler. Intersubband transitions of a quasi-two-dimensional electron gas in the strong disorder regime. *Phys. Rev. B*, 58 :7188–7196, 1998.
- [123] D. Stehr, C. Metzner, M. Helm, T. Roch, and G. Strasser. Resonant Impurity Bands in Semiconductor Superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :257401, 2005.
- [124] T. Antoni, M. Carras, X. Marcadet, B. Vinter, and V. Berger. Photoemission of Si 1s \rightarrow 2pz transition in GaAs/AlGaAs quantum well for zero-dimensional states infrared detection. *Applied Physics Letters*, 97(4) :042102, 2010.
- [125] D. Stehr, M. Helm, C. Metzner, and M. C. Wanke. Microscopic theory of impurity states in coupled quantum wells and superlattices. *Phys. Rev. B*, 74 :085311, 2006.
- [126] V. Tamosiunas, R. Zobl, J. Ulrich, K. Unterrainer, R. Colombelli, C. Gmachl, K. West, L. Pfeiffer, and F. Capasso. Terahertz quantum cascade lasers in a magnetic field. *Appl. Phys. Lett.*, 83(19) :3873–3875, 2003.
- [127] G. Scalari, C. Walther, L. Sirigu, M. L. Sadowski, H. Beere, D. Ritchie, N. Hoyler, M. Giovannini, and J. Faist. Strong confinement in terahertz intersubband lasers by intense magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 76 :115305, 2007.
- [128] A. Wade, G. Fedorov, D. Smirnov, S. Kumar, B. S. Williams, Q. Hu, and J. L. Reno. Magnetic-field-assisted terahertz quantum cascade laser operating up to 225 K. *Nature Photonics*, 3(1) :41–45, 2009.

- [129] F.-R. Jasnot, L.-A. de Vaultier, Y. Guldner, G. Bastard, A. Vasanelli, C. Manquest, C. Sirtori, M. Beck, and J. Faist. Direct surface cyclotron resonance terahertz emission from a quantum cascade structure. *Applied Physics Letters*, 100(10) :102103, 2012.
- [130] C. Ndebeka-Bandou, F. Carosella, R. Ferreira, and G. Bastard. Importance of the localization for inter-subband scattering rates in quasi two-dimensional structures. *Applied Physics Letters*, 102(19) :191105, 2013.
- [131] C. Priester, G. Allan, and M. Lannoo. Resonant impurity states in quantum-well structures. *Phys. Rev. B*, 29 :3408–3411, 1984.
- [132] G. Bastard. Hydrogenic impurity states in a quantum well : A simple model. *Phys. Rev. B*, 24 :4714–4722, 1981.
- [133] G. Scalari, S. Blaser, J. Faist, H. Beere, E. Linfield, D. Ritchie, and G. Davies. Terahertz Emission from Quantum Cascade Lasers in the Quantum Hall Regime : Evidence for Many Body Resonances and Localization Effects. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :237403, 2004.